

# Wellenleiterquantenelektrodynamik mit Mehrniveausystemen

D i s s e r t a t i o n

zur Erlangung des akademischen Grades

d o c t o r r e r u m n a t u r a l i u m

( Dr. rer. nat.)

im Fach Physik

eingereicht an der

Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät

der Humboldt-Universität zu Berlin

von

Diplom-Physiker Christoph Martens

Präsident der Humboldt-Universität zu Berlin

Prof. Dr. Jan-Hendrik Olbertz

Dekan der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät

Prof. Dr. Elmar Kulke

Gutachter/innen:

1. Prof. Dr. Kurt Busch
2. Prof. Dr. Oliver Benson
3. Prof. Dr. Jens Förstner

Tag der mündlichen Prüfung: 17. Dezember 2015



---

Ich erkläre, dass ich die Dissertation selbständig und nur unter Verwendung der von mir gemäß § 7 Absatz 3 der Promotionsordnung der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät, veröffentlicht im Amtlichen Mitteilungsblatt der Humboldt-Universität zu Berlin Nr. 21/2009 am 06.07.2009 angegebenen Hilfsmittel angefertigt habe.

Ich habe mich nicht anderwärts um einen Doktorgrad im Promotionsfach *Physik* beworben und besitze keinen Doktorgrad im Promotionsfach *Physik*.

Die Promotionsordnung der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät, veröffentlicht im Amtlichen Mitteilungsblatt der Humboldt-Universität zu Berlin Nr. 21/2009 am 06.07.2009 habe ich zur Kenntnis genommen.

Berlin, den 8. Oktober 2015



# EINLEITUNG

Als ich im Jahre 2011 Diplomand war, teilte ich ein Büro mit meinem Betreuer, einem damaligen Doktoranden der Arbeitsgruppe, in der ich meine Diplomarbeit schrieb. Mein Betreuer forschte auf dem Gebiet der Quantenoptik. Eines Tages suchte ein uns fremder Doktorand einer ingenieurwissenschaftlichen Fakultät unserer Universität unser Büro auf und trat an meinen Betreuer mit einer fachlichen Frage heran. Nachdem diese geklärt war, stellte er noch eine weitere und brisante Frage an meinen Betreuer. Diese lautete: „*Glaubst Du an die Existenz des Photons?*“

Da diese Frage derartig gestellt eher einen metaphysischen, als einen physikalischen Charakter aufweist, lässt sich heute wie damals über diese Frage nicht abschließend eindeutig entscheiden. Es ist jedoch eine Tatsache, dass sich die Grundannahme, das elektromagnetische Feld sei gequantelt, in vielen physikalischen Theorien als überaus erfolgreich erwiesen hat, um den Ausgang vieler Experimente korrekt zu beschreiben. Dies begann von etwa 110 Jahren, als es Albert Einstein 1905 gelang mit Hilfe seiner *Licht-Quanten-Hypothese* den lichtelektrischen Effekt zu erklären<sup>1</sup> [2].

Es ist heute unbestritten, dass das Photon aus physikalischer Sicht existiert. Mehr noch: Das in den letzten Dekaden seit Einsteins Hypothese gewachsene Verständnis der mikroskopischen Natur des Lichts und seiner Wechselwirkung mit Materie ging mit einem solchen technischen Fortschritt einher, dass die deutsche Bundesregierung 2010 auf ihrer Homepage einen Artikel mit dem Titel „Optische Technologien: Jahrhundert des Photons“ [3] veröffentlichte.

Ein weiteres Feld der Physik, das insbesondere in den letzten zwei Dekaden einen enormen Auftrieb erfahren hat, ist die Quanteninformationsverarbeitung [4]. Forscher, die auf diesem Gebiet arbeiten, versuchen gezielt die Quanteneigenschaften mikroskopischer, physikalischer Systeme zu kontrollieren, um so neuartige Verfahren der Informationsverarbeitung zu implementieren. Diese Verfahren lassen sich nicht mit Hilfe physikalischer Systeme implementieren, deren „Funktionsweise“ auch mit Hilfe eines *klassischen* physikalischen Systems realisiert werden könnte. Die zu klassischen Bits korrespondierenden Basiseinheiten der Quanteninformationsverarbeitung sind die sogenannten *Qubits* [5]. Solche Qubits sind physikalisch gesehen nichts anderes als quantenmechanische Zweiniveausysteme (2NS), die allerdings auch mit Hilfe anderer quantenmechanischer Mehrniveausysteme realisiert werden können [6].

Um in quanteninformationsverarbeitenden Systemen wie in einem klassischen Netzwerk verschiedene Netzwerkknoten zu verbinden, bietet sich das Photon als Transmitter an [7]. Ein Photon kann zum Beispiel über eindimensionale (1D) Wellenleiter von einem Netzwerkknoten zum nächsten geführt werden, um dort die „Quanteninformationen“ zum Beispiel in seine Polarisationszustände kodiert „aufzunehmen“ beziehungsweise wieder an einen Netzwerkknoten „abzugeben“. Hierzu müssen allerdings die grundlegenden Phänomene der Wechselwirkung von einzelnen Photonen mit anderen Quantensystemen in einer 1D Umgebung bekannt und verstanden sein.

---

<sup>1</sup>Inwieweit die Licht-Quanten-Hypothese verwertet werden muss, um den lichtelektrischen Effekt korrekt zu beschreiben, wird in Referenz [1] diskutiert.

## Einleitung

Die Wellenleiterquantenelektrodynamik (WQED) ist das Gebiet der Physik, das sich mit der Beschreibung des Transports von Photonen in Wellenleitern und der Wechselwirkung dieser Photonen mit anderen, an den Wellenleiter gekoppelten, lokalen Quantensystemen beschäftigt. Somit ist der Erfolg bei der Realisierung quanteninformationsverarbeitender Netzwerke unabdingbar mit dem Erfolg der Grundlagenforschung auf dem Gebiet der WQED verknüpft.

In der vorliegenden Dissertation werden physikalische Phänomene in WQED Systemen bestehend aus 1D Wellenleitern mit eingebetteten quantenmechanischen Mehrniveausystemen mittels hauptsächlich numerischer und teilweise analytischer Methoden theoretisch untersucht. Die Dissertation ist folgendermaßen gegliedert:

In Kapitel 1 präsentiere ich die Grundlagen der WQED, insoweit sie für das Verständnis der nachfolgenden Kapitel vonnöten sind. Dabei beschreibe ich insbesondere die Modellierung der Kopplung des quantisierten, elektromagnetischen Feldes im 1D Wellenleiter mit verschiedenen Arten von quantenmechanischen Mehrniveausystemen. In Kapitel 2 beschreibe ich, auf welche Weise ich das für die Studien in dieser Arbeit hauptsächlich verwendete Programm zur Simulation zeitabhängiger Phänomene in WQED implementiert habe. Die Performanz des Programms wird anhand numerischer Experimente getestet.

Von Ergebnissen der Untersuchungen zum Transport einzelner Photonen in 1D Wellenleitern mit eingebetteten Dreiniveausystemen (3NS) handelt Kapitel 3. Dabei sind die Fälle, in denen ein Übergang des 3NS von einem klassischen, elektromagnetischen Feld getrieben wird, von den ungetriebenen zu unterscheiden. In dem Kapitel werden beide Situationen untersucht.

In Kapitel 4 zeige ich, wie der Formalismus der Schmidt-Zerlegung auf WQED Systeme anzuwenden ist, um mit dessen Hilfe den Verschränkungsgrad zwischen einem quantenmechanischen Mehrniveausystem und dem Licht in einem 1D Wellenleiter quantitativ zu bestimmen. Ich untersuche in diesem Kapitel den Einfluss der Form eines Einzelphotonwellenpakets, das im Wellenleiter an einem 3NS gestreut wird, auf den Grad der bei dieser Streuung erzeugten Verschränkung zwischen 3NS und dem Photon im Wellenleiter.

Kapitel 5 behandelt die Emissionsdynamik zweier 2NS, die an verschiedenen Orten in einen 1D Wellenleiter eingebettet sind. Dazu stelle ich im Fall, dass zunächst ein 2NS angeregt ist, den Fall starker Kopplung zwischen 2NS und Wellenleiter dem Fall schwacher Kopplung gegenüber. Außerdem untersuche ich Phänomene, die bei der kollektiven Emission der beiden 2NS insbesondere im Hinblick auf die Eindimensionalität des betrachteten Systems, auftreten.

Abschließend fasse ich in Kapitel 6 die Ergebnisse aus den vorangegangenen Kapiteln dieser Dissertation zusammen. Ich beleuchte außerdem in einem Ausblick Ansätze zur Fortführung der mit dieser Arbeit auf dem Gebiet der WQED begonnenen Forschungsprojekte.

# INHALTSVERZEICHNIS

<b>EINLEITUNG</b>	<b>v</b>
<b>1 GRUNDLAGEN DER WELLENLEITERQUANTENELEKTRODYNAMIK</b>	<b>1</b>
1.1 Klassische Elektrodynamik dielektrischer Materialien auf makroskopischen Raumskalen	1
1.1.1 Die Maxwell'schen Gleichungen . . . . .	1
1.1.2 Die Lagrangedichte und die Hamiltonfunktion des elektromagnetischen Feldes	3
1.1.3 Die Poissonklammern in der verallgemeinerten Coulomb-Eichung . . . . .	3
1.2 Quantisierung des elektromagnetischen Feldes . . . . .	4
1.2.1 Die Kommutatorrelationen und der Hamiltonoperator $\hat{H}_{EM}$ des freien Feldes .	4
1.2.2 Entwicklung der Feldoperatoren in Feldeigenmoden des Hamiltonoperators $\hat{H}_{EM}$	5
1.3 Die Eigenzustände von $\hat{H}_{EM}$ , die Grundzustandsenergie, Vakuum- und andere Quantenfluktuationen . . . . .	7
1.3.1 Fockzustände . . . . .	7
1.3.2 Vakuumzustand und Vakuumfluktuationen . . . . .	8
1.3.3 Normalgeordnete Produkte . . . . .	9
1.3.4 Der Hamiltonoperator $\hat{H}_{EM}$ in normalgeordneter Form . . . . .	9
1.4 Die Wechselwirkung des elektromagnetischen Feldes mit anderen Mehrniveausystemen . . . . .	10
1.4.1 Quantenmechanische Mehrniveausysteme . . . . .	10
1.4.2 Licht-Materie-Wechselwirkung . . . . .	10
1.4.3 Übergang von komplexen zu reellen Kopplungskonstanten . . . . .	11
1.4.4 Drehwellennäherung . . . . .	12
1.4.5 Zweiniveausysteme und Anregungszahl . . . . .	14
1.4.6 Dreiniveausysteme . . . . .	15
1.5 Modellierung eindimensionaler Kontinua . . . . .	18
1.5.1 Photonische Kristalle . . . . .	18
1.5.2 Dispersionsrelationen eindimensionaler Wellenleiter . . . . .	19
1.5.3 Quantenmechanische Beschreibung eines eindimensionalen Wellenleiters im Ortsraum . . . . .	19
1.5.4 Ein eindimensionaler Wellenleiter mit Nächste-Nachbar-Wechselwirkung . . .	21
<b>2 GRUNDLAGEN ZUR NUMERISCHEN SIMULATION ZEITABHÄNGIGER PROZESSE IN DER WELLENLEITERQUANTENELEKTRODYNAMIK</b>	<b>23</b>
2.1 Zeitentwicklung im Schrödingerbild . . . . .	23
2.2 Numerische Zeitentwicklung reiner Zustände . . . . .	24
2.2.1 Der „naive“ Ansatz . . . . .	24

2.2.2	Krylov-Unterraum-Verfahren . . . . .	25
2.2.3	Quantenmechanische Zeitentwicklung mittels eines Krylov-Unterraum-Verfahrens . . . . .	27
2.3	Implementierung des Zeitentwicklungsverfahrens im Kontext der Wellenleiterquantenelektrodynamik . . . . .	29
2.3.1	Voraussetzungen und der Anregungszahloperator $\hat{C}$ . . . . .	29
2.3.2	Physikalische Deutung des Anregungszahloperators: Die Emissionszahl . . . .	30
2.3.3	Hamiltonoperatoren und allgemeine Zustände endlicher Anregungszahl . . . .	32
2.3.4	Zustände mit einer und zwei Anregungen und deren vektorielle Repräsentation	33
2.3.5	Implementierung der Matrix-Vektor-Produkte . . . . .	35
2.3.6	Abschließende Bemerkungen zur Implementierung . . . . .	35
2.3.7	Numerische Experimente . . . . .	35
<b>3</b>	<b>EINZELPHOTONTRANSPORT IN EINDIMENSIONALEN WELLENLEITERN MIT EINGEBETTETEN DREINIVEAUSYSTEMEN</b>	<b>41</b>
3.1	Einführung . . . . .	41
3.2	Transport einzelner Photonen in Wellenleitern mit eingebetteten ungetriebenen Dreiniveausystemen . . . . .	42
3.2.1	Grundlegendes zu den Transportsimulationen . . . . .	42
3.2.2	Anregung <i>nahezu</i> dunkler Zustände bei eingebettetem ungetriebenen V-System	44
3.2.3	Nichtstationäre dunkle Zustände und phasenabhängige Streueffekte bei eingebettetem ungetriebenen $\Lambda$ -System . . . . .	48
3.3	Transport einzelner Photonen in Wellenleitern durch stationär getriebene Dreiniveausysteme . . . . .	54
3.3.1	Beschreibung stationär getriebener Dreiniveausysteme . . . . .	54
3.3.2	Wechselwirkung getriebener Dreiniveausysteme mit einzelnen Photonen . . .	57
3.3.3	Elektromagnetisch beeinflusstes Streuverhalten bei eingebettetem getriebenen $\Lambda$ -System . . . . .	60
3.3.4	Impulstransfer bei eingebettetem getriebenen V-System . . . . .	62
3.4	Zusammenfassung . . . . .	64
<b>4</b>	<b>DIE SCHMIDT-ZERLEGUNG UND VERSCHRÄNKUNG IM KONTEXT DER WELLENLEITER-QUANTENELEKTRODYNAMIK</b>	<b>65</b>
4.1	Einführung . . . . .	65
4.2	Die Schmidt-Zerlegung und Verschränkung . . . . .	66
4.2.1	Grundlagen . . . . .	66
4.2.2	Die Schmidt-Zerlegung im Fall von Wellenleitern mit eingebetteten Mehrniveausystemen . . . . .	69
4.3	Verschränkung in einem eindimensionalen Wellenleiter mit einem eingebetteten $\Lambda$ -System	70
4.3.1	Das Modell . . . . .	70
4.3.2	Stationäre Lösung . . . . .	72
4.3.3	Erzeugung von Verschränkung durch Streuung von Einzelphotonwellenpaketen am $\Lambda$ -System . . . . .	74
4.4	Zusammenfassung . . . . .	81



<b>5</b>	<b>DYNAMIK DER PHOTONEMISSION ZWEIER ZWEINIVEAUSYSTEME IN EINEM EINDIMENSIONALEN WELLENLEITER</b>	<b>83</b>
5.1	Einführung . . . . .	83
5.2	Der Hamiltonoperator und seine Eigenschaften . . . . .	84
5.2.1	Das Modell . . . . .	84
5.2.2	Eigenspektrum und die Eigenzustände . . . . .	85
5.3	Emissionsdynamik bei einem angeregten Atom . . . . .	92
5.3.1	Schwache Kopplung . . . . .	93
5.3.2	Starke Kopplung . . . . .	98
5.4	Kollektive Emission, Super- und Subradianz . . . . .	103
5.5	Zusammenfassung . . . . .	109
<b>6</b>	<b>ZUSAMMENFASSUNG &amp; AUSBLICK</b>	<b>111</b>
6.1	Zusammenfassung . . . . .	111
6.2	Ausblick . . . . .	112
<b>A</b>	<b>MATHEMATISCHE HILFSMITTEL</b>	<b>115</b>
A.1	Die transversale $\delta$ -Distribution . . . . .	115
A.2	Der erste Green'sche Satz für Vektorfelder . . . . .	116
<b>B</b>	<b>ZUR TRANSFORMATION HERMITESCHER MATRIZEN</b>	<b>117</b>
B.1	Problemstellung . . . . .	117
B.2	Entwicklung von Operatoren durch Generatoren der $SU(n)$ . . . . .	117
B.3	Die Drehmatrix $\underline{U}$ . . . . .	118
B.4	Die verallgemeinerten Gell-Mann-Matrizen als Generatoren einer Darstellung der $SU(n)$ . . . . .	120
<b>C</b>	<b>ALGORITHMEN ZU DEN PRODUKTEN <math>\hat{H} \Psi\rangle_1</math> UND <math>\hat{H} \Psi\rangle_2</math></b>	<b>121</b>
C.1	Wirkung des Hamiltonoperators auf Zustände mit $\mathcal{C} = 1$ und $\mathcal{C} = 2$ . . . . .	121
C.2	Die resultierenden Algorithmen zum Matrix-Vektor-Produkt . . . . .	122
	<b>PUBLIKATIONEN &amp; VERSCHIEDENES</b>	<b>128</b>
	<b>DANKSAGUNG</b>	<b>129</b>
	<b>LITERATUR</b>	<b>136</b>



# ABKÜRZUNGSVERZEICHNIS

$k$ -Raum	Impulsraum	20
1D	eindimensional	v
1KF	Einkanalfall	48
2D	zweidimensional	18
2KF	Zweikanalfall	48
2NS	Zweiniveausystem	v
3D	dreidimensional	18
3NS	Dreiniveausystem	vi
CZ	Kavitätszustand	88
EIT	Elektromagnetisch induzierte Transparenz	42
EIW	Elektromagnetisch induzierte Wechselwirkung	61
FWHM	Halbwertsbreite	75
JCM	Jaynes-Cummings-Modell	14
NDZ	<i>Nahezu</i> dunkler Zustand	46
NNWW	Nächste-Nachbar-Wechselwirkung	21
PZ	Polaritonischer Zustand	90
Q.E.D.!	Quod erat demonstrandum!	68
RWA	Drehwellennäherung	12
SZ	Streuzustand	86
VGM	Verallgemeinerte Gell-Mann-Matrizen	120
WQED	Wellenleiterquantenelektrodynamik	vi



# 1 GRUNDLAGEN DER WELLENLEITER- QUANTENELEKTRODYNAMIK

*In diesem Kapitel präsentiere ich die Grundlagen der WQED, also der Quantentheorie der elektromagnetischen Strahlung in eindimensionalen Wellenleitern in Wechselwirkung mit einzelnen Mehrniveauquantensystemen. Hierzu gehe ich zunächst von der klassischen Feldtheorie der elektromagnetischen Strahlung in einem Dielektrikum aus, die ich kanonisch quantisiere. Dann diskutiere ich einige Eigenschaften des quantisierten elektromagnetischen Feldes und seiner Energieeigenzustände.*

*Im nächsten Schritt modelliere ich die Wechselwirkung des elektromagnetischen Feldes mit anderen Quantensystemen im Rahmen der Dipolkopplung und innerhalb der Drehwellennäherung. Ich gehe auf die einfachsten quantenmechanischen Mehrniveausysteme, die Zwei- und Dreiniveausysteme, ein und illustriere im letzten Abschnitt die quantenmechanische Beschreibung eines eindimensionalen Wellenleiters.*

## 1.1 Klassische Elektrodynamik dielektrischer Materialien auf makroskopischen Raumskalen

### 1.1.1 Die Maxwell'schen Gleichungen

Die Grundlage der klassischen Elektrodynamik sind die Maxwell'schen Gleichungen. Zur Beschreibung elektromagnetischer Felder auf räumlich makroskopischer Skala in Abwesenheit freier Ladungen und Ströme lauten die Maxwell'schen Gleichungen [8]:

$$\nabla \cdot \mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = 0, \quad (1.1a)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = 0, \quad (1.1b)$$

$$\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\partial_t \mathbf{B}(\mathbf{r}, t), \quad (1.1c)$$

$$\nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = +\partial_t \mathbf{D}(\mathbf{r}, t). \quad (1.1d)$$

Hierbei ist  $\mathbf{D}(\mathbf{r}, t)$  die dielektrische Verschiebungsdichte,  $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$  die magnetische Flussdichte,  $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$  das elektrische und  $\mathbf{H}(\mathbf{r}, t)$  das magnetische Feld.

Im Folgenden beschränke ich mich auf verlustlose, nichtdispersive, lineare, nichtmagnetische und isotrope Dielektrika. Somit sind die dielektrische Verschiebungsdichte  $\mathbf{D}(\mathbf{r}, t)$  und die magnetische Flussdichte  $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$  über die Beziehungen

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = \varepsilon_0 \varepsilon(\mathbf{r}) \mathbf{E}(\mathbf{r}, t), \quad (1.2a)$$

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\mu_0} \mathbf{B}(\mathbf{r}, t), \quad (1.2b)$$

mit dem elektrischen Feld  $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$  beziehungsweise dem magnetischen Feld  $\mathbf{H}(\mathbf{r}, t)$  verknüpft [9]. In Gleichung (1.2) ist  $\varepsilon(\mathbf{r})$  mit  $|\varepsilon(\mathbf{r})| > 0 \forall \mathbf{r}$  die rein reellwertige, relative dielektrische Funktion<sup>1</sup>,  $\varepsilon_0$  die Vakuumpermittivität [11] und  $\mu_0$  die Vakuumpermeabilität [11]. Aus den Gleichungen (1.1c), (1.1d) und (1.2) lassen sich Wellengleichungen für die Felder  $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$  und  $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$  herleiten:

$$\varepsilon_0 \partial_t^2 \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) + \nabla \times \left( \frac{\nabla \times \mathbf{B}(\mathbf{r}, t)}{\mu_0 \varepsilon(\mathbf{r})} \right) = 0, \quad (1.3a)$$

$$\frac{1}{c_0^2} \partial_t^2 \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + \frac{\nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, t))}{\varepsilon(\mathbf{r})} = 0, \quad (1.3b)$$

mit der Vakuumlichtgeschwindigkeit  $c_0 = (\varepsilon_0 \mu_0)^{-\frac{1}{2}}$  [11].

Analog zum Vorgehen in der Elektrostatik ist es üblich,  $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$  und  $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$  in Abhängigkeit eines skalaren Potentials  $\Phi(\mathbf{r}, t)$  und eines Vektorpotential  $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$  auszudrücken:

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}, t), \quad (1.4a)$$

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\nabla \Phi(\mathbf{r}, t) - \partial_t \mathbf{A}(\mathbf{r}, t). \quad (1.4b)$$

Die Definition von  $\Phi(\mathbf{r}, t)$  und  $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$  in den Gleichung (1.4) bestimmt diese beiden Potentialfelder nicht eindeutig, sondern enthält Eichfreiheiten in der Wahl von  $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$  und  $\Phi(\mathbf{r}, t)$ . Ich wähle aufgrund der Abwesenheit freier Ladungen eine auf verlustlose, nichtdispersive, lineare, nichtmagnetische und isotrope Dielektrika verallgemeinerte Variante der Coulomb-Eichung [9]

$$\nabla \cdot (\varepsilon(\mathbf{r}) \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)) = 0, \quad (1.5a)$$

$$\Phi(\mathbf{r}, t) = 0. \quad (1.5b)$$

Mit den Gleichungen (1.2), (1.4) und (1.5) werden die Maxwell'schen Gleichungen (1.1) reduziert auf eine Bewegungsgleichung für das Vektorpotential

$$\varepsilon_0 \partial_t^2 \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) + \frac{\nabla \times (\nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}, t))}{\mu_0 \varepsilon(\mathbf{r})} = 0 \quad (1.6a)$$

$$\Leftrightarrow \varepsilon_0 \varepsilon(\mathbf{r}) \partial_t^2 \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) + \frac{\nabla \times (\nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}, t))}{\mu_0} = 0. \quad (1.6b)$$

---

<sup>1</sup>Ein rein reelles und zeitunabhängiges  $\varepsilon(\mathbf{r}) \neq 1$  verletzt die Kramers-Kronig-Relationen [8] und ist somit streng genommen nicht kausal. Dies liegt daran, dass ich mich hier auf verlustlose und nichtdispersive Dielektrika beschränkt habe, wobei Verlustlosigkeit  $\text{Im}(\varepsilon(\mathbf{r}, t)) = 0$  impliziert. Im Allgemeinen sind diese zwei Annahmen unphysikalisch. Allerdings weisen manche in der experimentellen Optik oft verwendete Materialien, wie zum Beispiel BK7-Glas [10], in einem breiten Wellenlängenbereich eine dielektrische Funktion mit nahezu konstantem Real- und nahezu verschwindenden Imaginärteil auf. Wenn man sich auf diesen Wellenlängenbereich beschränkt, sind diese Materialien kaum dispersiv und nahezu verlustlos. Beim BK7-Glas ist dies für Wellenlängen von circa 370nm bis etwa 1500nm gegeben. In diesem Bereich gilt für dieses Glas  $1.5354 \leq \text{Re}(\varepsilon) \leq 1.5013$ , während für den Imaginärteil  $\text{Im}(\varepsilon) \approx 10^{-8}$  gilt [10].

Das Vektorpotential  $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$  folgt also in der gewählten Eichung formal derselben Bewegungsgleichung wie das elektrische Feld in Gleichung (1.3b). Gleichzeitig ergibt sich durch die Anwendung der Rotation  $\nabla \times$  auf Gleichung (1.6a) und mit Gleichung (1.4a) die Wellengleichung (1.3a) für  $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$ . Die Umformung zu Gleichung (1.6b) habe ich vorgenommen, um im Folgenden die Hamiltonfunktion des elektromagnetischen Feldes in ihrer konventionellen Form angeben können.

### 1.1.2 Die Lagrangedichte und die Hamiltonfunktion des elektromagnetischen Feldes

Die Lagrangedichte<sup>2</sup>

$$\mathcal{L} \equiv \frac{\varepsilon_0 \varepsilon(\mathbf{r})}{2} |\partial_t \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)|^2 - \frac{1}{2\mu_0} |\nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)|^2, \quad (1.7)$$

führt mit Hilfe der komponentenweise auszuwertenden Euler-Lagrange-Gleichung [12]

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial A_i(\mathbf{r}, t)} - \sum_{j=1,2,3} \partial_j \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial [\partial_j A_i(\mathbf{r}, t)]} - \partial_t \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial [\partial_t A_i(\mathbf{r}, t)]} = 0 \quad (i = 1, 2, 3), \quad (1.8)$$

auf die Bewegungsgleichung (1.6b). Das zur Feldkomponente  $A_i(\mathbf{r}, t)$  kanonisch konjugierte Feld  $\Pi_i(\mathbf{r}, t)$  ergibt sich zu

$$\Pi_i(\mathbf{r}, t) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial [\partial_t A_i(\mathbf{r}, t)]} = \varepsilon_0 \varepsilon(\mathbf{r}) \partial_t A_i(\mathbf{r}, t) \stackrel{(1.2a)}{\underset{(1.4b)(1.5b)}}{-D_i(\mathbf{r}, t)}. \quad (1.9)$$

Die Größe  $D_i(\mathbf{r}, t)$  ist hierbei die  $i$ -te Komponente der dielektrischen Verschiebungsdichte  $\mathbf{D}(\mathbf{r}, t)$ . Mit den Gleichungen (1.7) und (1.9) lässt sich nun mit Hilfe einer Legendretransformation die Hamiltonfunktion<sup>3</sup> des elektromagnetischen Feldes im Volumen  $V$  des betrachteten Mediums angeben

$$\begin{aligned} \tilde{H}_{\text{EM}} &= \int_V d^3r \left( \sum_{i=1,2,3} \Pi_i(\mathbf{r}, t) \partial_t A_i(\mathbf{r}, t) - \mathcal{L} \right) \\ &\stackrel{(1.7)(1.9)}{=} \frac{1}{2} \int_V d^3r \left( \frac{1}{\varepsilon_0 \varepsilon(\mathbf{r})} |\boldsymbol{\Pi}(\mathbf{r}, t)|^2 + \frac{1}{\mu_0} |\nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)|^2 \right). \end{aligned} \quad (1.10)$$

### 1.1.3 Die Poissonklammern in der verallgemeinerten Coulomb-Eichung

Zur kanonischen Quantisierung der Feldtheorie benötige ich die Poissonklammern der kanonisch konjugierten Felder  $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$  und  $\boldsymbol{\Pi}(\mathbf{r}, t)$  [12]. Hierzu muss ich die Eichbedingungen (1.5) berücksichtigen,

<sup>2</sup> Eine Lagrangedichte hängt im Allgemeinen von den zu beschreibenden Feldern, deren partiellen Zeitableitungen und Gradienten ab [12]. In unserem Fall sind die zu beschreibenden Felder die drei Komponenten von  $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ . Zu Gunsten der besseren Übersicht werden die neun Argumente unserer Lagrangedichte hier und im Folgenden weggelassen.

<sup>3</sup>Für die Hamiltonfunktion  $H_{\text{EM}}$  gelten die gleichen funktionalen Abhängigkeiten, wie für die Lagrangedichte  $\mathcal{L}$  (siehe Fußnote 2) mit Ausnahme der Feldgradienten, die durch die Integration über den  $\mathbb{R}^3$  wegfallen. Die Argumente von  $H_{\text{EM}}$  lasse ich auch hier zur besseren Übersichtlichkeit weg.

welche die Unabhängigkeit der Komponenten von  $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$  aufhebt. Demnach verschwindet die folgende Poissonklammer:

$$0 = \left\{ \nabla \cdot (\varepsilon(\mathbf{r}) \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)), \Pi_j(\mathbf{r}', t) \right\} = \sum_{i=1,2,3} \partial_i \left( \varepsilon(\mathbf{r}) \left\{ A_i(\mathbf{r}, t), \Pi_j(\mathbf{r}', t) \right\} \right). \quad (1.11)$$

An Gleichung (1.11) lässt sich erkennen, dass

$$\left\{ A_i(\mathbf{r}, t), \Pi_j(\mathbf{r}', t) \right\} \neq \delta_{ij} \delta^{(3)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}'),$$

mit der dreidimensionalen  $\delta$ -Distribution  $\delta^{(3)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$  und dem Kroneckersymbol  $\delta_{ij}$ . Stattdessen gilt hier [9, 12]

$$\left\{ A_i(\mathbf{r}, t), \Pi_j(\mathbf{r}', t) \right\} = \frac{\delta_{\perp ij}^{(3)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{\varepsilon(\mathbf{r})} \equiv \delta_{\perp ij}^{(\varepsilon)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (1.12)$$

mit der *transversalen  $\delta$ -Distribution*  $\delta_{\perp ij}^{(3)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ . Die Definition, sowie einige wichtige Eigenschaften dieser Distribution habe ich im Anhang A.1 aufgelistet. Mit Gleichung (1.12) wird die Gültigkeit von Gleichung (1.11) sichergestellt, da nach Gleichung (A.9)

$$\sum_{i=1,2,3} \partial_i \delta_{\perp ij}^{(3)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = 0. \quad (1.13)$$

## 1.2 Quantisierung des elektromagnetischen Feldes

### 1.2.1 Die Kommutatorrelationen und der Hamiltonoperator $\hat{H}_{\text{EM}}$ des freien Feldes

Zum Übergang zur bosonischen Quantenfeldtheorie im Heisenbergbild wende ich das Korrespondenzprinzip [13] an und ersetze konjugierte Felder durch Feldoperatoren und die Poissonklammer in Gleichung (1.12) durch den entsprechenden Kommutator<sup>4</sup>:

$$\left[ \hat{A}_i(\mathbf{r}, t), \hat{\Pi}_j(\mathbf{r}', t) \right] = i\hbar \delta_{\perp ij}^{(\varepsilon)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (1.14a)$$

$$\left[ \hat{A}_i(\mathbf{r}, t), \hat{A}_j(\mathbf{r}', t) \right] = \left[ \hat{\Pi}_i(\mathbf{r}, t), \hat{\Pi}_j(\mathbf{r}', t) \right] = 0. \quad (1.14b)$$

Der Hamiltonoperator des freien elektromagnetischen Feldes im betrachteten Medium ergibt sich ausgedrückt durch die Feldoperatoren zu

$$\hat{H}_{\text{EM}} \stackrel{(1.10)}{=} \frac{1}{2} \int_V d^3r \left( \frac{1}{\varepsilon_0 \varepsilon(\mathbf{r})} \left| \hat{\mathbf{\Pi}}(\mathbf{r}, t) \right|^2 + \frac{1}{\mu_0} \left| \nabla \times \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t) \right|^2 \right). \quad (1.15)$$

<sup>4</sup>Die Wahl der bosonischen Quantisierung des elektromagnetischen Feldes mag auf den ersten Blick willkürlich erscheinen. Die fermionische Quantisierung durch den Austausch der Poissonklammer aus Gleichung (1.12) durch den entsprechenden Antikommutator führt jedoch schon bei der Quantisierung des elektromagnetischen Feldes in Vakuum zur Verletzung der Mikrokausalität, siehe zum Beispiel Referenz [12]. Daher wähle ich die bosonische Quantisierung, trotz der bereits vorhandenen Defizite des hier vorgestellten Modells bezüglich Kausalität, siehe Fußnote 1.



### 1.2.2 Entwicklung der Feldoperatoren in Feldeigenmoden des Hamiltonoperators $\hat{H}_{\text{EM}}$

In mit den Kreisfrequenzen  $\omega_\nu$  assoziierten Feldeigenmoden  $\mathbf{f}_\nu(\mathbf{r})$  ausgedrückt lautet der Feldoperator  $\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t)$

$$\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t) = \sum_\nu \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0\omega_\nu V}} \left( \hat{a}_\nu(t) \mathbf{f}_\nu(\mathbf{r}) + \hat{a}_\nu^\dagger(t) \mathbf{f}_\nu^*(\mathbf{r}) \right), \quad (1.16)$$

mit  $\hbar$ , dem reduzierten Planck'schen Wirkungsquantum [11]. Diese  $\mathbf{f}_\nu(\mathbf{r})$  müssen nach Gleichung (1.6a) die Eigenwertgleichung

$$\frac{\omega_\nu^2}{c_0^2} \mathbf{f}_\nu(\mathbf{r}) = \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \nabla \times (\nabla \times \mathbf{f}_\nu(\mathbf{r})), \quad (1.17)$$

mit dem Eigenwert  $\omega_\nu^2/c_0^2$ , sowie die Eichbedingung Gleichung (1.5a) [9, 14]

$$\nabla \cdot (\varepsilon(\mathbf{r}) \mathbf{f}_\nu(\mathbf{r})) = 0, \quad (1.18)$$

erfüllen. Somit sind die Komponenten dieser Eigenmoden nicht unabhängig voneinander, sondern es gilt

$$\sum_\nu [\mathbf{f}_\nu(\mathbf{r})]_i [\mathbf{f}_\nu^*(\mathbf{r}')]_j = \frac{V}{\varepsilon(\mathbf{r}')} \delta_{\perp ij}^{\varepsilon}(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (1.19)$$

Die  $\mathbf{f}_\nu(\mathbf{r})$  sind unter der Wahl angemessener Randbedingungen<sup>5</sup> orthogonal bezüglich des Skalarproduktes

$$\frac{1}{V} \int_V d^3r \varepsilon(\mathbf{r}) \mathbf{f}_\nu(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{f}_{\nu'}^*(\mathbf{r}) = \delta_{\nu\nu'}. \quad (1.20)$$

Die Wellengleichung (1.6) ist invariant unter Zeitumkehr [15]. Diese Symmetrie manifestiert sich in den Modenfunktionen  $\mathbf{f}_\nu(\mathbf{r})$  dadurch, dass sich unter allen Modenfunktionen immer auch die komplex konjugierte einer bestimmten Modenfunktion finden lässt, das heißt

$$\mathbf{f}_\nu^* = \mathbf{f}_{\nu' \neq \nu}. \quad (1.21)$$

Weitere Eigenschaften der  $\mathbf{f}_\nu(\mathbf{r})$  ergeben sich aus der Entwicklung des Feldoperators  $\hat{\mathbf{B}}(\mathbf{r}, t)$ : Es gilt nach Gleichung (1.4a)

$$\hat{\mathbf{B}}(\mathbf{r}, t) = \nabla \times \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t) = \sum_\nu \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0\omega_\nu V}} \left( \hat{a}_\nu(t) (\nabla \times \mathbf{f}_\nu(\mathbf{r})) + \hat{a}_\nu^\dagger(t) (\nabla \times \mathbf{f}_\nu^*(\mathbf{r})) \right). \quad (1.22)$$

Der Operator  $\hat{\mathbf{B}}(\mathbf{r}, t)$  erfüllt die Wellengleichung (1.3a), woraus sich zusammen mit Gleichung (1.22) die Eigenwertgleichung

$$\frac{\omega_\nu^2}{c_0^2} \tilde{\mathbf{f}}_\nu(\mathbf{r}) = \nabla \times \left( \frac{\nabla \times \tilde{\mathbf{f}}_\nu(\mathbf{r})}{\varepsilon(\mathbf{r})} \right), \quad (1.23)$$

<sup>5</sup>Geeignete Randbedingungen sind zum Beispiel periodische Randbedingungen, unter denen das Volumen  $V$  dem der Wigner-Seitz-Zelle entspricht, oder Dirichlet-Randbedingungen, unter denen die  $\mathbf{f}_\nu(\mathbf{r})$  auf dem Rand des betrachteten Volumens verschwinden.

mit dem zu dem aus Gleichung (1.17) identischen Eigenwert  $\omega_\nu^2/c_0^2$  ergibt, wobei die durch

$$\tilde{\mathbf{f}}_\nu(\mathbf{r}) = \nabla \times \mathbf{f}_\nu(\mathbf{r}), \quad (1.24)$$

definierten neuen Modenfunktionen mit der Einheit einer reziproken Länge behaftet sind. Die somit dimensionsbehafteten Eigenfunktionen  $\tilde{\mathbf{f}}_\nu(\mathbf{r})$  der Eigenwertgleichung (1.23) sind unter den gegebenen Randbedingungen, siehe Fußnote 5, orthogonal bezüglich des Skalarproduktes

$$\frac{c_0^2}{\omega_\nu^2 V} \int_V d^3r \tilde{\mathbf{f}}_\nu(\mathbf{r}) \cdot \tilde{\mathbf{f}}_{\nu'}^*(\mathbf{r}) = \delta_{\nu\nu'}. \quad (1.25)$$

Die Herkunft des Skalierungsfaktors  $c_0^2/\omega_\nu^2$  zeige ich mit Hilfe des ersten Green'schen Satzes für Vektorfelder [16] in Anhang A.2.

Für die Entwicklung des kanonisch konjugierten Feldoperators ergibt sich

$$\hat{\Pi}(\mathbf{r}, t) \stackrel{(1.9)}{=} -i\varepsilon(\mathbf{r}) \sum_\nu \sqrt{\frac{\hbar\omega_\nu\varepsilon_0}{2V}} \left( \hat{a}_\nu(t)\mathbf{f}_\nu(\mathbf{r}) - \hat{a}_\nu^\dagger(t)\mathbf{f}_\nu^*(\mathbf{r}) \right). \quad (1.26)$$

Setzt man nun in den Hamiltonoperator aus Gleichung (1.15) die Entwicklungen der Feldoperatoren aus den Gleichungen (1.22) und (1.26) ein und führt die Volumenintegration in Gleichung (1.15) unter Berücksichtigung der Gleichungen (1.20), (1.21) und (1.25) aus, so ergibt sich die diagonale Form von  $\hat{\tilde{H}}_{\text{EM}}$

$$\hat{\tilde{H}}_{\text{EM}} = \sum_\nu \frac{\hbar\omega_\nu}{2} \left( \hat{a}_\nu(t)\hat{a}_\nu^\dagger(t) + \hat{a}_\nu^\dagger(t)\hat{a}_\nu(t) \right). \quad (1.27)$$

Aus den Gleichungen (1.14) und (1.16) sowie (1.19) und (1.26) folgt, dass für die Operatoren  $\hat{a}_\nu^\dagger$  und  $\hat{a}_\nu$  die bosonischen Vertauschungsrelationen

$$\left[ \hat{a}_\nu(t), \hat{a}_{\nu'}^\dagger(t) \right] = \delta_{\nu\nu'}, \quad (1.28a)$$

$$\left[ \hat{a}_\nu(t), \hat{a}_{\nu'}(t) \right] = \left[ \hat{a}_\nu^\dagger(t), \hat{a}_{\nu'}^\dagger(t) \right] = 0, \quad (1.28b)$$

gelten. Diese Operatoren folgen außerdem einer harmonischen Zeitentwicklung

$$\hat{a}_\nu(t) = e^{-i\omega_\nu t} \hat{a}_\nu(0), \quad (1.29)$$

wie sich mit Hilfe der Heisenberg'schen Bewegungsgleichung [13] und den Gleichungen (1.27), (1.28a) und (1.28b) zeigen lässt. Mit der Kommutatorrelation aus Gleichung (1.28a) ergibt Gleichung (1.27)

$$\hat{\tilde{H}}_{\text{EM}} = \sum_\nu \hbar\omega_\nu \left( \hat{a}_\nu^\dagger(t)\hat{a}_\nu(t) + \frac{1}{2} \right) \stackrel{(1.29)}{=} \sum_\nu \hbar\omega_\nu \left( \hat{a}_\nu^\dagger(0)\hat{a}_\nu(0) + \frac{1}{2} \right). \quad (1.30)$$

Der Hamiltonoperator  $\hat{\tilde{H}}_{\text{EM}}$  des freien elektromagnetischen Feldes ist also im Heisenbergbild zeitunabhängig.

## 1.3 Die Eigenzustände von $\hat{H}_{\text{EM}}$ , die Grundzustandsenergie, Vakuum- und andere Quantenfluktuationen

### 1.3.1 Fockzustände

Der Hamiltonoperator  $\hat{H}_{\text{EM}}$  aus Gleichung (1.27) ist aufgrund von Gleichung (1.29) weder explizit, noch implizit zeitabhängig. Ich betrachte in dieser Arbeit im Folgenden Operatoren und Zustände im Schrödingerbild. Ausnahmen werden im Text an den entsprechenden Stellen explizit angegeben. Im Schrödingerbild sind auch die Operatoren  $\hat{a}_\nu^\dagger$  und  $\hat{a}_\nu$  zeitunabhängig. Die Dynamik eines quantenmechanischen Systems, beschrieben durch einen Hamiltonoperator  $\hat{H}$ , im Zustand  $|\Psi(t_0)\rangle$  wird in diesem Bild durch die Schrödingergleichung [13]

$$i\hbar\partial_t|\Psi(t)\rangle = \hat{H}|\Psi(t)\rangle, \quad (1.31)$$

bestimmt. Der Ansatz  $|\Psi(t)\rangle = \exp(-iEt/\hbar)|E\rangle$  überführt Gleichung (1.31) in eine Eigenwertgleichung für den Hamiltonoperator  $\hat{H}$

$$E|E\rangle = \hat{H}|E\rangle, \quad (1.32)$$

mit den mit  $\hat{H}$  verknüpften stationären Eigenzuständen  $|E\rangle$  und Energieeigenwerten  $E$ .

Die Eigenzustände von  $\hat{H}_{\text{EM}}$  sind sämtliche Produktzustände  $|\mathbf{n}_\nu\rangle$  aus Energieeigenzuständen  $\{|n_\nu\rangle\}$  der einzelnen Feldmoden,

$$\hat{H}_{\text{EM}}|\mathbf{n}_\nu\rangle = \tilde{E}_{\mathbf{n}_\nu}|\mathbf{n}_\nu\rangle, \quad (1.33a)$$

$$\text{wobei } |\mathbf{n}_\nu\rangle \equiv |n_1, n_2, n_3, \dots\rangle \equiv |n_1\rangle \otimes |n_2\rangle \otimes |n_3\rangle \otimes \dots, \quad (1.33b)$$

mit  $n_\nu \in \mathbb{N}_0$  und der Eigenenergie  $\tilde{E}_{\mathbf{n}_\nu}$ , wobei

$$\tilde{E}_{\mathbf{n}_\nu} = \sum_{\nu} \tilde{E}_{n_\nu}, \quad (1.34a)$$

$$\text{mit } \frac{\hbar\omega_\nu}{2}(\hat{a}_\nu\hat{a}_\nu^\dagger + \hat{a}_\nu^\dagger\hat{a}_\nu)|n_\nu\rangle = \tilde{E}_{n_\nu}|n_\nu\rangle. \quad (1.34b)$$

Diese Zustände werden Fockzustände genannt und sind bezüglich jeder Eigenmode orthonormiert

$$\langle n_1, n_2, n_3, \dots | n'_1, n'_2, n'_3, \dots \rangle = \delta_{n_1 n'_1} \delta_{n_2 n'_2} \delta_{n_3 n'_3} \dots \quad (1.35)$$

Die Operatoren  $\hat{a}_\nu$  und  $\hat{a}_\nu^\dagger$  wirken folgendermaßen auf die Fockzustände:

$$\hat{a}_\nu|\dots, n_{\nu-1}, n_\nu, n_{\nu+1}, \dots\rangle = \sqrt{n_\nu}|\dots, n_{\nu-1}, n_\nu - 1, n_{\nu+1}, \dots\rangle, \quad (1.36a)$$

$$\hat{a}_\nu^\dagger|\dots, n_{\nu-1}, n_\nu, n_{\nu+1}, \dots\rangle = \sqrt{n_\nu + 1}|\dots, n_{\nu-1}, n_\nu + 1, n_{\nu+1}, \dots\rangle. \quad (1.36b)$$

Diese Relationen folgen aus der bosonischen Algebra, Gleichungen (1.28a) und (1.28b), der Operatoren  $\hat{a}_\nu^\dagger$  und  $\hat{a}_\nu$ . Mit Gleichung (1.34) ergibt sich für die Eigenenergien  $\tilde{E}_{\mathbf{n}_\nu}$  und somit für das Spektrum von  $\hat{H}_{\text{EM}}$

$$\tilde{E}_{\mathbf{n}_\nu} = \sum_{\nu} \hbar\omega_\nu \left( n_\nu + \frac{1}{2} \right). \quad (1.37)$$

Die Operatoren  $\hat{a}_\nu^\dagger(t)$  und  $\hat{a}_\nu(t)$  sind nach den Gleichungen (1.36) und (1.37) die Erzeugungs- beziehungsweise Vernichtungsoperatoren für elementare Anregungen des elektromagnetischen Feldes - kurz: *Photonen* - in der entsprechenden Feldmode mit Subskript  $\nu$  und Kreisfrequenz  $\omega_\nu$ . Die Zahl  $n_\nu$  entspricht der Anzahl der Photonen der Mode  $\nu$  in einem Fockzustand. Bemerkenswerterweise verschwinden die Erwartungswerte des elektromagnetischen Feldes für Fockzustände

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{n}_\nu | \hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}) | \mathbf{n}_\nu \rangle &= \langle \mathbf{n}_\nu | \hat{\mathbf{D}}(\mathbf{r}) | \mathbf{n}_\nu \rangle = \langle \mathbf{n}_\nu | \hat{\mathbf{B}}(\mathbf{r}) | \mathbf{n}_\nu \rangle \\ &= \langle \mathbf{n}_\nu | \hat{\mathbf{H}}(\mathbf{r}) | \mathbf{n}_\nu \rangle = 0 \quad \forall \quad | \mathbf{n}_\nu \rangle .\end{aligned}\quad (1.38)$$

### 1.3.2 Vakuumzustand und Vakuumfluktuationen

Die  $(n_\nu + 1)$ -fache Anwendung von  $\hat{a}_\nu$  auf einen Zustand mit  $n_\nu$  Photonen in Mode  $\nu$  führt auf den Grundzustand dieser Mode. Der Grundzustand des elektromagnetischen Feldes ist wiederum der Produktzustand der Grundzustände aller Feldmoden. In ihm sind keine Photonen enthalten. Aus Gleichung (1.37) lässt sich die Energie  $\tilde{E}_0$  dieses Grundzustandes von  $\hat{H}_{\text{EM}}$  entnehmen,

$$\tilde{E}_0 = \sum_\nu \frac{\hbar \omega_\nu}{2} . \quad (1.39)$$

Der korrespondierende Zustand

$$|0\rangle \equiv |0, 0, 0, \dots\rangle , \quad (1.40)$$

wird auch als Vakuumzustand bezeichnet.

Da die Anzahl der Moden des elektromagnetischen Feldes in einem räumlich beschränkten aber räumlich kontinuierlichen Medium - kurz *Kontinuum* - unendlich ist, divergieren die Eigenenergien  $\tilde{E}_{\mathbf{n}_\nu}$  aus Gleichung (1.37) und somit im Speziellen auch die Eigenenergie  $E_0$  des Vakuumzustandes aus Gleichung (1.39). Die Eigenenergie des Zustandes, der keine Photonen enthält, verschwindet also dementsprechend nicht. Dies ist eine direkte Folge der Kommutatorrelation Gleichung (1.28a), mit deren Hilfe ich den Hamiltonoperator  $\hat{H}_{\text{EM}}$  in Abschnitt 1.2.2 auf die Form aus Gleichung (1.30) gebracht habe.

Der gleiche Mechanismus, der zu dieser Grundzustandsenergie führt, ist auch die Ursache, dass die Varianzen der elektromagnetischen Felder für den Vakuumzustand nicht verschwinden. So gilt zum Beispiel für die dielektrische Verschiebungsdichte

$$\begin{aligned}\langle 0 | (\Delta \hat{\mathbf{D}}(\mathbf{r}))^2 | 0 \rangle &= \langle 0 | \hat{\mathbf{D}}(\mathbf{r}) | 0 \rangle^2 - \langle 0 | \hat{\mathbf{D}}(\mathbf{r}) \cdot \hat{\mathbf{D}}(\mathbf{r}) | 0 \rangle \\ &\stackrel{(1.9)}{=} \stackrel{(1.26)(1.38)}{-} \frac{\varepsilon_0 \varepsilon(\mathbf{r})^2}{2V} \sum_\nu \hbar \omega_\nu |\mathbf{f}_\nu(\mathbf{r})|^2 .\end{aligned}\quad (1.41)$$

Alle höheren Kumulanten von  $\hat{\mathbf{D}}(\mathbf{r})$  bezüglich  $|0\rangle$  verschwinden. Daher fluktuiert der Messwert der Feldstärke des  $\mathbf{D}(\mathbf{r})$ -Feldes im Vakuumzustand um den Wert null, gaußverteilt mit der ortsabhängigen Varianz aus Gleichung (1.41). Diese Fluktuationen werden in der Literatur als *Vakuumfluktuationen*<sup>6</sup>

<sup>6</sup>Die Argumentation, dass die Vakuumfluktuationen aus den Kommutatorrelationen Gleichungen (1.28a) und (1.28b) folgen, lässt sich auch umdrehen: Aus den Vakuumfluktuationen lässt sich über die Unschärferelation der konjugierten Felder in Gleichung (1.16) und Gleichung (1.26) eine obere Grenze für die Kommutatorrelationen Gleichung (1.14) und somit letztendlich auch für die Kommutatoren in Gleichung (1.28a) und Gleichung (1.28b) bestimmen. Somit können die Vakuumfluktuationen auch als Ursache der Kommutatorrelationen und nicht als deren Wirkung gedeutet werden.

### 1.3 Die Eigenzustände von $\hat{H}_{\text{EM}}$ , die Grundzustandsenergie, Vakuum- und andere Quantenfluktuationen

bezeichnet [17] und sind die Quantenfluktuationen im Grundzustand eines Systems. Die Vakuumfluktuationen gehen also aus dem intrinsisch-stochastischen Charakter der Quantentheorie hervor. Sie sind für die Forschung interessant, da die Physik von Grundzuständen in der statistischen Mechanik mit der Physik bei der Temperatur des absoluten Nullpunkts assoziiert wird, bei dem keine *klassischen* thermischen Fluktuationen mehr auftreten. Physikalische Phänomene, die in diesem Kontext diskutiert werden, sind zum Beispiel die Lamb-Verschiebung der Energien des Elektrons im Zentralpotential [18], das Auftreten von Casimir- und Van-der-Waals-Kräften [17], sowie der Unruh-Effekt [17], aufgrund dessen sich ein beschleunigter Beobachter thermischer Strahlung ausgesetzt sieht, die ein dazu ruhender Beobachter nicht registriert.

#### 1.3.3 Normalgeordnete Produkte

In dieser Arbeit untersuche ich physikalische Vorgänge, bei denen die Vakuumfluktuationen des freien elektromagnetischen Feldes selbst keine Rolle spielen und bei deren mathematischer Beschreibung die mit den Vakuumfluktuationen verknüpften Terme, wie zum Beispiel die divergierende Eigenenergie des Vakuumzustandes  $\tilde{E}_0$  aus Gleichung (1.39), nur Achsenabschnittsversetzungen darstellen. Um diese Terme zu eliminieren, nutze ich das so genannte *normalgeordnete Produkt*. Wie in Gleichung (1.16) für  $\hat{A}(\mathbf{r}, t)$  geschehen, lässt sich ein Feldoperator  $\hat{\phi}(\mathbf{r}, t)$  im Heisenbergbild in einen Anteil positiver und einen Anteil negativer Frequenz zerlegen

$$\hat{\phi}(\mathbf{r}, t) = \hat{\phi}^{(+)}(\mathbf{r}, t) + \hat{\phi}^{(-)}(\mathbf{r}, t), \quad (1.42)$$

wobei im Falle von Gleichung (1.16) und generell im Falle des elektromagnetischen Feldes der positive Frequenzanteil nach Gleichung (1.29)  $\propto \hat{a}_\nu(t)$  und der negative Frequenzanteil  $\propto \hat{a}_\nu^\dagger(t)$  sind. Im Schrödingerbild gelten bezüglich  $\hat{a}_\nu^\dagger$  und  $\hat{a}_\nu$  dieselben Proportionalitäten, auch hier spricht man trotz der Zeitunabhängigkeit der Operatoren von positiven und negativen Frequenzanteilen.

Hat man nun zwei bosonische Feldoperatoren  $\hat{\phi}$  und  $\hat{\chi}$ , so ist das normalgeordnete Produkt dieser Operatoren definiert durch

$$:\hat{\phi}\hat{\chi}: \equiv \hat{\phi}^{(-)}\hat{\chi}^{(-)} + \hat{\phi}^{(-)}\hat{\chi}^{(+)} + \hat{\chi}^{(-)}\hat{\phi}^{(+)} + \hat{\phi}^{(+)}\hat{\chi}^{(+)} . \quad (1.43)$$

Auf diese Weise eliminiert man in allen Operatorgleichungen die mit den Vakuumfluktuationen assoziierten Terme. Effekte, die mit allen übrigen Quantenfluktuationen in Verbindung gebracht werden, bleiben jedoch auch bei Theorien in normalgeordneter Darstellung erhalten.

#### 1.3.4 Der Hamiltonoperator $\hat{H}_{\text{EM}}$ in normalgeordneter Form

Der Hamiltonoperator des elektromagnetischen Feldes aus Gleichung (1.27) ergibt sich in normalgeordneter Form zu

$$\hat{H}_{\text{EM}} = : \hat{H}_{\text{EM}} : = \sum_{\nu} \hbar \omega_{\nu} \hat{a}_{\nu}^{\dagger} \hat{a}_{\nu} . \quad (1.44)$$

Die Fockzustände  $|\mathbf{n}_{\nu}\rangle$  bleiben von der Normalordnung unberührt, jedoch ergibt sich das Spektrum von  $\hat{H}_{\text{EM}}$  zu

$$E_{\mathbf{n}_{\nu}} = \sum_{\nu} \hbar \omega_{\nu} n_{\nu} , \quad (1.45)$$

mit

$$\hat{H}_{\text{EM}}|\mathbf{n}_\nu\rangle = E_{\mathbf{n}_\nu}|\mathbf{n}_\nu\rangle. \quad (1.46)$$

An Gleichung (1.45) lässt sich ablesen, dass die Eigenenergie  $E_0$  des Vakuumzustandes  $|0\rangle$  nun verschwindet. Selbiges gilt ebenso für die normalgeordnete Varianz der elektrischen Verschiebungsdichte bezüglich  $|0\rangle$

$$\langle 0|:(\Delta\hat{\mathbf{D}}(\mathbf{r}))^2:|0\rangle = \langle 0|\hat{\mathbf{D}}(\mathbf{r})|0\rangle^2 - \langle 0|:\hat{\mathbf{D}}(\mathbf{r}) \cdot \hat{\mathbf{D}}(\mathbf{r}):|0\rangle = 0. \quad (1.47)$$

In den folgenden Abschnitten dieser Arbeit werde ich für den Hamiltonoperator des freien, elektromagnetischen Feldes die normalgeordnete Version aus Gleichung (1.44) verwenden.

## 1.4 Die Wechselwirkung des elektromagnetischen Feldes mit anderen Mehrniveausystemen

### 1.4.1 Quantenmechanische Mehrniveausysteme

In diesem Abschnitt soll die Wechselwirkung des elektromagnetischen Feldes mit quantenmechanischen Mehrniveausystemen modelliert werden. Der Hamiltonoperator  $\hat{H}_A$  eines solchen Systems lautet in seiner Eigenbasis

$$\hat{H}_A = \sum_l E_l |l\rangle\langle l|, \quad (1.48)$$

mit den Eigenenergien  $E_l$  und den Eigenzuständen  $|l\rangle$ . Ich fordere außerdem, dass sich jedem Zustand  $|l\rangle$  eine wohldefinierte Parität zuordnen lässt,  $\hat{H}_A$  also mit dem Paritätsoperator vertauscht und somit invariant gegenüber Raumspiegelungen [13] ist.

Realistische Mehrniveausysteme mit den oben genannten Eigenschaften können sowohl natürliche, als auch künstliche Atome [19], zum Beispiel Quantenpunkte [20] oder supraleitende Atome [21] sein. Auch Mehrelektronenatome oder mehrere Einzelelektronenatome lassen sich durch Gleichung (1.48) beschreiben. Ohne diese Allgemeinheit zu beschneiden, beschränken wir uns sprachlich auf den Begriff *Atom* für alle im Folgenden behandelten Mehrniveausysteme.

### 1.4.2 Licht-Materie-Wechselwirkung

In den meisten optischen Systemen übertrifft die Wellenlänge der elektromagnetischen Strahlung die Ausdehnung der mit dieser Strahlung wechselwirkenden, atomaren Systeme um mehrere Größenordnungen. Aus diesem Grund hat sich die Beschreibung der Wechselwirkung elektromagnetischer Strahlung mit einzelnen Atomen als eine Dipolwechselwirkung, in der das Atom als punktförmig angenähert wird, als sehr erfolgreich erwiesen. Ich beschreibe daher auch in dieser Arbeit die Licht-Materie-Kopplung als eine solche Wechselwirkung in der genannten Näherung. Der Hamiltonoperator, der diesen Wechselwirkungsmechanismus beschreibt, lautet [22]

$$\hat{H}_{\text{LM}} = -\frac{\hat{\mathbf{d}} \cdot \hat{\mathbf{D}}(\mathbf{r}_0)}{\varepsilon_0}. \quad (1.49)$$

In dieser Gleichung ist  $\hat{\mathbf{D}}(\mathbf{r}_0)$  der Operator der dielektrischen Verschiebungsdichte

$$\hat{\mathbf{D}}(\mathbf{r}) \stackrel{(1.9)}{=} -\hat{\mathbf{\Pi}}(\mathbf{r}) \stackrel{(1.26)}{=} i\varepsilon(\mathbf{r}) \sum_{\nu} \sqrt{\frac{\hbar\omega_{\nu}\varepsilon_0}{2V}} \left( \hat{\mathbf{a}}_{\nu} \mathbf{f}_{\nu}(\mathbf{r}) - \hat{\mathbf{a}}_{\nu}^{\dagger} \mathbf{f}_{\nu}^*(\mathbf{r}) \right), \quad (1.50)$$

am Ort des Atoms  $\mathbf{r}_0$  und  $\hat{\mathbf{d}}$  ist der Dipoloperator, der die Dipolmomente der atomaren Übergänge beschreibt. In der Basis des Atoms aus Gleichung (1.48) entwickelt lautet der Dipoloperator

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{d}} &= \sum_{l,l'} |l\rangle \langle l| \hat{\mathbf{d}} |l'\rangle \langle l'| \\ &= \sum_{\substack{l,l'>l, \\ p_l \neq p_{l'}}} \left( \mathbf{d}_{ll'} |l\rangle \langle l'| + \mathbf{d}_{ll'}^* |l'\rangle \langle l| \right). \end{aligned} \quad (1.51)$$

Die Matrixelemente  $\mathbf{d}_{ll'}$  des Dipoloperators verschwinden für Zustände mit gleichen Paritäten  $p_l$ , da  $\hat{\mathbf{d}}$  ein vektorieller Operator ist [23]. Mit den Gleichungen (1.50) und (1.51) ergibt sich  $\hat{\mathbf{H}}_{\text{LM}}$  zu

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{H}}_{\text{LM}} &= -i\varepsilon(\mathbf{r}_0) \sum_{\substack{l,l'>l, \\ p_l \neq p_{l'}}} \sum_{\nu} \sqrt{\frac{\hbar\omega_{\nu}\varepsilon_0}{2V}} \left( \mathbf{d}_{ll'} \cdot \mathbf{f}_{\nu}(\mathbf{r}_0) \hat{\mathbf{a}}_{\nu} |l\rangle \langle l'| - \mathbf{d}_{ll'} \cdot \mathbf{f}_{\nu}^*(\mathbf{r}_0) |l\rangle \langle l'| \hat{\mathbf{a}}_{\nu}^{\dagger} + \text{h.c.} \right) \\ &= \sum_{\substack{l,l'>l, \\ p_l \neq p_{l'}}} \sum_{\nu} \left( \tilde{V}_{ll'}^{\nu} \hat{\mathbf{a}}_{\nu} |l\rangle \langle l'| + \tilde{W}_{ll'}^{\nu} |l\rangle \langle l'| \hat{\mathbf{a}}_{\nu}^{\dagger} + \text{h.c.} \right), \end{aligned} \quad (1.52)$$

mit den Kopplungsstärken

$$\tilde{V}_{ll'}^{\nu} = -i\varepsilon(\mathbf{r}_0) \sqrt{\frac{\hbar\omega_{\nu}\varepsilon_0}{2V}} \mathbf{d}_{ll'} \cdot \mathbf{f}_{\nu}(\mathbf{r}_0), \quad (1.53a)$$

$$\tilde{W}_{ll'}^{\nu} = +i\varepsilon(\mathbf{r}_0) \sqrt{\frac{\hbar\omega_{\nu}\varepsilon_0}{2V}} \mathbf{d}_{ll'} \cdot \mathbf{f}_{\nu}^*(\mathbf{r}_0). \quad (1.53b)$$

Die mit den Kopplungsstärken assoziierte Frequenz

$$\Omega_{ll'}^{\nu} = \frac{|\tilde{V}_{ll'}^{\nu}|}{\hbar} = \frac{|\tilde{W}_{ll'}^{\nu}|}{\hbar}, \quad (1.54)$$

fixiert die Zeitskala, auf der Übergangsprozesse zwischen den Zuständen  $|l\rangle$  und  $|l'\rangle$  bei gleichzeitiger Erzeugung oder Vernichtung eines Photons in Mode  $k$  ablaufen.

### 1.4.3 Übergang von komplexen zu reellen Kopplungskonstanten

Die Kopplungskonstanten aus Gleichung (1.53) sind im Allgemeinen komplexwertig. Ist die Dimension  $d$  des gemeinsamen Hilbertraumes  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{EM}} \otimes \mathcal{H}_{\text{A}}$ , mit dem Hilbertraum der Zustände des elektromagnetischen Feldes  $\mathcal{H}_{\text{EM}}$  und des atomaren Systems  $\mathcal{H}_{\text{A}}$ , endlich, so lässt sich eine unitäre Abbildung  $\hat{\mathcal{U}}$  finden, unter der alle Kopplungskonstanten des transformierten Hamiltonoperators

$$\hat{\mathbf{H}}_{\text{LM}} = \hat{\mathcal{U}}^{\dagger} \hat{\mathbf{H}}_{\text{LM}} \hat{\mathcal{U}}, \quad (1.55)$$

reellwertig sind, während  $\hat{H}_{\text{EM}}$  und  $\hat{H}_A$  unter der gleichen Transformation invariant bleiben. Die Erwartungswerte  $\langle \hat{W}(t) \rangle$  eines beliebigen, linearen Operators  $\hat{W}$  bezüglich eines Zustandes  $|\tilde{\Psi}(t)\rangle$ , dessen Zeitentwicklung von  $\hat{H}_{\text{LM}}$  erzeugt wird, sind identisch zu den Erwartungswerten des transformierten Operators  $\tilde{W} = \hat{U}^\dagger \hat{W} \hat{U}$  bezüglich eines entsprechend transformierten Zustandes  $|\Psi(t)\rangle = \hat{U}^\dagger |\tilde{\Psi}(t)\rangle$ , dessen Zeitentwicklung durch  $\hat{H}_{\text{LM}}$  erzeugt wird.

Wenn man  $\hat{H}_{\text{LM}}$  bezüglich der Produktbasis  $\{|\mathbf{n}_\nu, l\rangle\} = \{|\mathbf{n}_\nu\rangle \otimes |l\rangle\}$  aus Fockzuständen  $|\mathbf{n}_\nu\rangle$  und atomaren Zuständen  $|l\rangle$  entwickelt, so ergibt sich

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{LM}} = & \sum_{l,l'>l} \sum_{\nu} \sum_{n_\nu} \sqrt{n_\nu} \left( \tilde{V}_{ll'}^\nu |n_\nu - 1, l\rangle \langle n_\nu, l'| + \tilde{V}_{ll'}^{*\nu} |n_\nu, l'\rangle \langle n_\nu - 1, l| \right. \\ & \left. + \tilde{W}_{ll'}^{*\nu} |n_\nu - 1, l'\rangle \langle n_\nu, l| + \tilde{W}_{ll'}^\nu |n_\nu, l\rangle \langle n_\nu - 1, l'| \right) \otimes \prod_{\nu' \neq \nu} \sum_{n_{\nu'}} |n_{\nu'}\rangle \langle n_{\nu'}|. \end{aligned} \quad (1.56)$$

Die korrespondierende Entwicklung von  $\hat{H}_{\text{LM}}$  mit rein reellen Kopplungskonstanten  $V_{ll'}^\nu = |\tilde{V}_{ll'}^\nu|$  und  $W_{ll'}^\nu = |\tilde{W}_{ll'}^\nu|$  lautet:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{LM}} = & \sum_{l,l'>l} \sum_{\nu} \sum_{n_\nu} \sqrt{n_\nu} \left( V_{ll'}^\nu \left( |n_\nu - 1, l\rangle \langle n_\nu, l'| + |n_\nu, l'\rangle \langle n_\nu - 1, l| \right) \right. \\ & \left. + W_{ll'}^\nu \left( |n_\nu - 1, l'\rangle \langle n_\nu, l| + |n_\nu, l\rangle \langle n_\nu - 1, l'| \right) \right) \otimes \prod_{\nu' \neq \nu} \sum_{n_{\nu'}} |n_{\nu'}\rangle \langle n_{\nu'}|. \end{aligned} \quad (1.57)$$

Anhand der beiden Entwicklungen aus den Gleichungen (1.56) und (1.57) wird klar, dass die Kopplungskonstanten in der Produktbasis der Eigenzustände von  $\hat{H}_{\text{EM}}$  und  $\hat{H}_A$  die Nebendiagonalelemente von  $\hat{H}_{\text{LM}}$  beziehungsweise  $\hat{H}_{\text{LM}}$  sind. Da  $\hat{H}_{\text{EM}}$  und  $\hat{H}_A$  in dieser Basis diagonal sind und unter der Transformation invariant bleiben sollen, darf  $\hat{U}$  in dieser Basis also nur auf Nebendiagonalelemente wirken. Im Anhang B zeige ich, dass unter den genannten Voraussetzungen die gesuchte unitäre Abbildung  $\hat{U}$  existiert. Aus diesen Gründen beschränke ich mich in dieser Arbeit bezüglich der Licht-Materie-Wechselwirkung ausschließlich auf den Hamiltonoperator

$$\hat{H}_{\text{LM}} = \sum_{\substack{l,l'>l, \\ p_l \neq p_{l'}}} \sum_{\nu} \left( V_{ll'}^\nu \left( \hat{a}_\nu |l\rangle \langle l'| + |l'\rangle \langle l| \hat{a}_\nu^\dagger \right) + W_{ll'}^\nu \left( \hat{a}_\nu |l'\rangle \langle l| + |l\rangle \langle l'| \hat{a}_\nu^\dagger \right) \right), \quad (1.58)$$

mit rein reellen Kopplungsstärken  $V_{ll'}^\nu$  und  $W_{ll'}^\nu$ .

#### 1.4.4 Drehwellennäherung

Ein Näherungsverfahren, das den Umfang des an der Licht-Materie-Wechselwirkung beteiligten Anteil des atomaren Hilbertraumes stark reduziert, ist die so genannte *Drehwellennäherung* (engl. *rotating wave approximation (RWA)*) [24]. Um die RWA einzuführen, ist es nützlich den Hamiltonoperator  $\hat{H} = \hat{H}_{\text{EM}} + \hat{H}_A + \hat{H}_{\text{LM}}$  in das Wechselwirkungsbild [13] zu transformieren. In diesem Fall re-



präsentiert  $\hat{H}_{\text{LM}}$  den Wechselwirkungsterm, dessen transformierte Version

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{LM}}^{\text{WW}} &= e^{+i(\hat{H}_{\text{EM}}+\hat{H}_{\text{A}})\frac{t}{\hbar}} \hat{H}_{\text{LM}} e^{-i(\hat{H}_{\text{EM}}+\hat{H}_{\text{A}})\frac{t}{\hbar}} \\ &\stackrel{(1.44)}{=} \sum_{\substack{l,l'>l, \\ p_l \neq p_{l'}}} \sum_{\nu} \left( V_{ll'}^{\nu} \left( e^{+i\frac{E_l-E_{l'}-\hbar\omega_{\nu}}{\hbar}t} \hat{a}_{\nu}|l\rangle\langle l'| + e^{-i\frac{E_l-E_{l'}-\hbar\omega_{\nu}}{\hbar}t} |l'\rangle\langle l|\hat{a}_{\nu}^{\dagger} \right) \right. \\ &\quad \left. + W_{ll'}^k \left( e^{-i\frac{E_l-E_{l'}+\hbar\omega_{\nu}}{\hbar}t} \hat{a}_{\nu}|l'\rangle\langle l| + e^{+i\frac{E_l-E_{l'}+\hbar\omega_{\nu}}{\hbar}t} |l\rangle\langle l'|\hat{a}_{\nu}^{\dagger} \right) \right), \end{aligned} \quad (1.59)$$

die Zeitentwicklung der Zustände im Wechselwirkungsbild bestimmt.

Ich nehme im Folgenden ohne Beschränkung der Allgemeinheit an, dass  $E_l \geq E_{l'}$ . Die RWA stützt sich nun auf die Annahme, dass nur resonante und annähernd resonante Terme in Gleichung (1.59) mit

$$E_l - E_{l'} \approx \omega_{\nu}. \quad (1.60)$$

physikalisch relevant sind. Für diese resonanten und nahezu resonanten Terme verschwinden die Exponenten in den Exponentialfunktionen in Gleichung (1.59) näherungsweise. Dies können ausschließlich Terme  $\propto V_{ll'}^{\nu}$  sein. Die Exponenten in den verbleibenden Termen inklusive aller Terme  $\propto W_{ll'}^{\nu}$ , den so genannten gegenläufig rotierenden Termen, bleiben in jedem Fall endlich<sup>7</sup>.

Da die Frequenz  $\Omega_{ll'}^{\nu}$  aus Gleichung (1.54) die für den entsprechenden Prozess fundamentale Zeitskala festlegt, würden sich somit sowohl die gegenläufig rotierenden, als auch die nicht resonanten Terme auf dieser Zeitskala herausmitteln, sofern diese Terme mit einer deutlich höheren Frequenz oszillieren, also

$$\frac{|E_l - E_{l'} \pm \hbar\omega_{\nu}|}{\hbar} \gg \Omega_{ll'}^{\nu}, \quad \text{für alle nichtresonanten } (-) \text{ oder gegenläufig } (+) \text{ rotierenden Terme.} \quad (1.61)$$

In diesem Fall kann man diese Terme in Gleichung (1.59) und somit auch in Gleichung (1.58) vernachlässigen. Dies ist nicht möglich, wenn der Betrag der Kopplungsstärke  $|V_{ll'}^{\nu}|$  und damit auch die Frequenz  $\Omega_{ll'}^{\nu}$  in der gleichen Größenordnung wie die Kreisfrequenzen der nicht resonanten beziehungsweise gegenläufig rotierenden Terme liegen. Dann sind auch diese Terme für die Dynamik eines Systems relevant, man spricht in diesem Fall von *ultrastarker Kopplung* [25].

Bei den Systemen, die ich in dieser Arbeit betrachte, kann davon ausgegangen werden, dass die atomaren Übergänge nicht ultrastark an das elektromagnetische Feld koppeln und außerdem Übergänge zwischen entarteten atomaren Zuständen nicht dipolerlaubt sind. Somit ergibt sich der Hamiltonoperator  $\hat{H}_{\text{LM}}$  im Rahmen der RWA zu

$$\hat{H}_{\text{LM}} = \sum_{\substack{l,l'>l, \\ p_l \neq p_{l'} \\ E_l - E_{l'} \approx \omega_{\nu}}} \sum_{\nu} V_{ll'}^{\nu} \left( \hat{a}_{\nu}|l\rangle\langle l'| + |l'\rangle\langle l|\hat{a}_{\nu}^{\dagger} \right). \quad (1.62)$$

<sup>7</sup>Eine Ausnahme bildet hier der Fall, wenn zwei Eigenenergien  $E_l$  und  $E_{l'}$  eines atomaren Übergangs entartet wären. Für diesen Übergang hätten alle vier Exponenten in Gleichung (1.59) den Wert  $\pm i\omega_{\nu}t$  und somit würden im Resonanzfall auch die Exponenten in den Termen  $\propto W_{ll'}^{\nu}$  verschwinden. In diesem Fall gäbe es also keine gegenläufig rotierenden Terme.

Dieser Hamiltonoperator weist eine Besonderheit auf: Photonen werden nur erzeugt, wenn das Atom von einem energetisch höherem zu einem energetisch niedriger liegenden Eigenzustand  $|l\rangle$  übergeht. Umgekehrt werden Photonen nur dann vernichtet, wenn das Atom von einem energetisch niedrigeren in einen energetisch höheren Eigenzustand wechselt. Prozesse der erstgenannten Art sind Emissionsprozesse, bei denen das Atom ein Photon emittiert. Prozesse der zweiten Art sind Absorptionsprozesse, ein Photon wird absorbiert. Diese Klassifizierung ist nur im Rahmen der RWA möglich und auch nur, wenn, wie angenommen, sowohl die entsprechende atomare Übergangsenergie, als auch die Energie des beteiligten Photons nicht verschwinden, vergleiche Fußnote 7.

#### 1.4.5 Zweiniveausysteme und Anregungszahl

Das wohl einfachste quantenmechanische Mehrniveausystem, in dem sich nichttriviale Dynamiken beobachten lassen, ist ein 2NS. Ein 2NS ist ein geeignetes Modell für ein physikalisches Atom, wenn alle bis auf einen der atomaren Übergänge entweder nicht dipolerlaubt oder energetisch zur mit dem Atom wechselwirkenden elektromagnetischen Strahlung stark verstimmt sind. Im letzteren Fall dürfen die nicht-resonanten atomaren Übergänge nicht ultrastark an die Strahlung gekoppelt sein, vergleiche Abschnitt 1.4.4.

Seien der Grundzustand eines nichtentarteten 2NS  $|\downarrow\rangle$  und der angeregte Zustand  $|\uparrow\rangle$ . Ist die Übergangsenergie zwischen diesen Zuständen  $E_{\uparrow\downarrow}$  und gelte ohne Beschränkung der Allgemeinheit für die Eigenenergie des Grundzustandes  $E_{\downarrow} = 0$ , so lautet der atomare Hamiltonoperator

$$\hat{H}_A = E_{\uparrow\downarrow} |\uparrow\rangle\langle\uparrow|. \quad (1.63)$$

Im Rahmen der RWA lautet der Hamiltonoperator der Licht-Materie-Wechselwirkung

$$\hat{H}_{LM} = \sum_{\nu} V_{\nu} \left( \hat{a}_{\nu} |\uparrow\rangle\langle\downarrow| + |\downarrow\rangle\langle\uparrow| \hat{a}_{\nu}^{\dagger} \right), \quad (1.64)$$

mit der Abkürzung  $V_{\nu} \equiv V_{\uparrow\downarrow}^{\nu}$

Es ist zweckmäßig und zu den Gleichung (1.63) und (1.64) physikalisch äquivalent ein 2NS auch mit Hilfe von Paulimatrizen  $\hat{\sigma}_z \equiv |\uparrow\rangle\langle\uparrow| - |\downarrow\rangle\langle\downarrow|$ ,  $\hat{\sigma}^+ \equiv |\uparrow\rangle\langle\downarrow|$  und  $\hat{\sigma}^- \equiv |\downarrow\rangle\langle\uparrow|$  zu beschreiben [24]. Die Hamiltonoperatoren lauten dann

$$\hat{H}_A = \frac{E_{\uparrow\downarrow}}{2} \hat{\sigma}_z, \quad (1.65)$$

und

$$\hat{H}_{LM} = \sum_{\nu} V_{\nu} \left( \hat{a}_{\nu} \hat{\sigma}^+ + \hat{\sigma}^- \hat{a}_{\nu}^{\dagger} \right). \quad (1.66)$$

Mit  $\hat{H}_{EM}$  aus Gleichung (1.44) bilden die Hamiltonoperatoren aus den Gleichungen (1.65) und (1.66) die vielmodige Version des berühmten Jaynes-Cummings-Modells (JCM) [24]. Wie beim gewöhnlichen JCM separiert auch der Hilbertraum des hier vorgestellten vielmodigen JCM in Unterräume konstanter Anregungszahlen  $\mathcal{C}$ . Der entsprechende Anregungszahloperator

$$\hat{\mathcal{C}} = \sum_{\nu} \hat{a}_{\nu}^{\dagger} \hat{a}_{\nu} + |\uparrow\rangle\langle\uparrow| \quad (1.67a)$$

$$= \sum_{\nu} \hat{a}_{\nu}^{\dagger} \hat{a}_{\nu} + \frac{1}{2} (\hat{\sigma}_z + \mathbb{1}), \quad (1.67b)$$

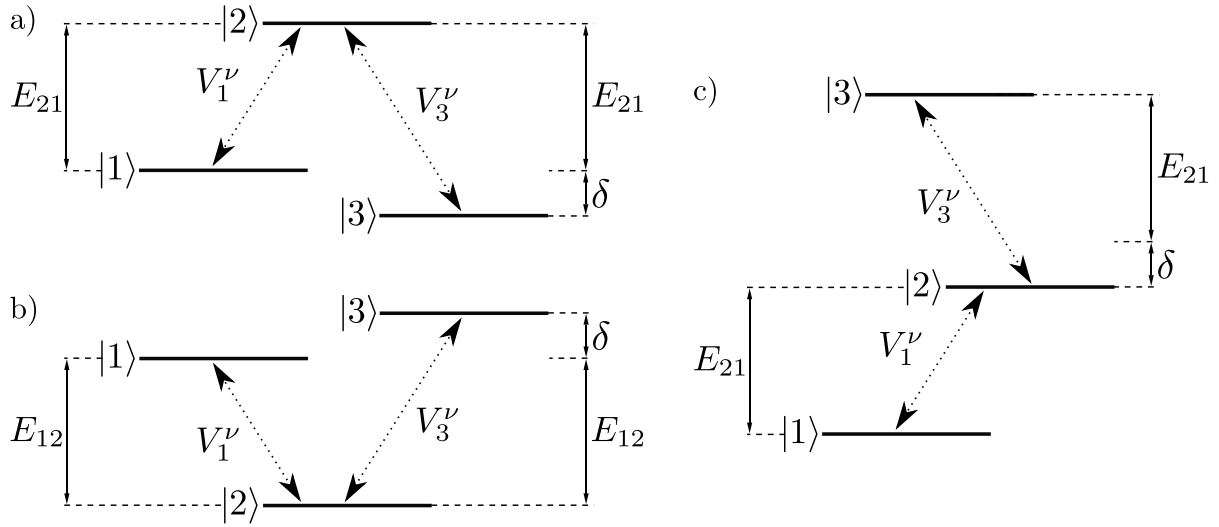


Abbildung 1.1: Paritätsbehaftete 3NS bestehend aus drei Zuständen  $|1\rangle$ ,  $|2\rangle$  und  $|3\rangle$ . Die Pfeile symbolisieren die dipolerlaubten Übergänge, die mit den Kopplungsstärken  $V_l^\nu$  mit  $l \in \{1, 3\}$  an das elektromagnetische Kontinuum gekoppelt sind. a) Ein  $\Lambda$ -System mit Übergangsenergien  $E_{21}$  beziehungsweise  $E_{21} + \delta$ . b) Ein V-System mit Übergangsenergien  $E_{12}$  beziehungsweise  $E_{12} + \delta$ . c) Ein  $\Xi$ -System mit den gleichen Übergangsenergien wie in a).

kommutiert mit dem Hamiltonoperator des vielmodigem JCM, so dass

$$\partial_t \langle \hat{C}(t) \rangle = 0 \quad \forall t, \quad (1.68)$$

für jeden beliebigen Zustand im vielmodigem JCM gilt. Die Größe des zu betrachtenden Hilbertraumes ist somit bei endlicher Anzahl photonischer Moden  $\nu$  selbst endlich und lässt sich daher im Falle niedriger Anregungszahlen auf den ebenso endlichen Speicher eines modernen Arbeitsplatzrechners abbilden. Diese Eigenschaft ist bei der numerischen Behandlung solcher Systeme sehr hilfreich.

Eine Voraussetzung für diesen Separationsmechanismus ist die Anwendung der RWA. Gleichzeitig muss aber auch die Struktur der dipolerlaubten Übergänge im Termschema des atomaren Systems besondere Bedingungen erfüllen. Dies diskutiere ich in Abschnitt 2.3.

### 1.4.6 Dreiniveausysteme

Die nach den 2NS nächstprimitiven Mehrniveausysteme sind die 3NS. Wie im Abschnitt 1.4.2 beschrieben, sind Dipolübergänge in paritätsbehafteten Mehrniveausystemen nur zwischen Zuständen unterschiedlicher Parität erlaubt. Somit sind in einem solchen 3NS entweder kein Übergang oder genau zwei Übergänge dipolerlaubt. Es ergeben sich drei mögliche Anordnungen für die Termschemata paritätsbehafteter 3NS, die in Abbildung 1.1 abgebildet sind.

### Das $\Lambda$ -System

Abbildung 1.1a) zeigt ein  $\Lambda$ -System. Ein solches 3NS besteht aus zwei Zuständen, hier  $|1\rangle$  und  $|3\rangle$ , von denen jeweils die Übergänge zu einem energetisch höher liegendem Zustand, hier  $|2\rangle$ , dipolerlaubt sind. Das Termschema dieses Systems gleicht somit einer - bisweilen unsymmetrischen - Variante des Buchstaben  $\Lambda$ . Entsprechend Abbildung 1.1a) lautet der atomare Hamiltonoperator

$$\hat{H}_A = E_1|1\rangle\langle 1| + (E_1 + E_{21})|2\rangle\langle 2| + (E_1 - \delta)|3\rangle\langle 3|. \quad (1.69)$$

Der Parameter  $\delta$  bestimmt hier und auch bei den weiter unten vorgestellten paritätsbehafteten 3NS die Verstimmung der beiden dipolerlaubten Übergänge zueinander. Der Hamiltonoperator der Wechselwirkung des  $\Lambda$ -Systems mit dem elektromagnetischen Feld lautet nach Abbildung 1.1a)

$$\hat{H}_{LM} = \sum_{l=1,3} \sum_{\nu} V_l^{\nu} \left( \hat{a}_{\nu}|2\rangle\langle l| + |l\rangle\langle 2|\hat{a}_{\nu}^{\dagger} \right), \quad (1.70)$$

mit  $V_l^{\nu} \equiv V_{2l}^{\nu}$ . Der Anregungszahloperator  $\hat{C}$  lautet in diesem Fall

$$\hat{C} = \sum_{\nu} \hat{a}_{\nu}^{\dagger} \hat{a}_{\nu} + |2\rangle\langle 2|. \quad (1.71)$$

### Das V-System

Sind die dipolerlaubten Übergänge V-förmig angeordnet, das heißt, gibt es einen Grundzustand, von dem Dipolübergänge zu zwei energetisch höher liegenden Zuständen erlaubt sind, spricht man von einem V-System. Ein solches 3NS ist in Abbildung 1.1b) mit dem Grundzustand  $|2\rangle$  und zwei weiteren Zuständen  $|1\rangle$  und  $|3\rangle$  dargestellt. Sein atomarer Hamiltonoperator schreibt sich

$$\hat{H}_A = (E_2 + E_{12})|1\rangle\langle 1| + E_2|2\rangle\langle 2| + (E_2 + E_{12} + \delta)|3\rangle\langle 3|. \quad (1.72)$$

Der Wechselwirkungshamiltonoperator lautet in diesem Fall

$$\hat{H}_{LM} = \sum_{l=1,3} \sum_{\nu} V_l^{\nu} \left( \hat{a}_{\nu}|l\rangle\langle 2| + |2\rangle\langle l|\hat{a}_{\nu}^{\dagger} \right). \quad (1.73)$$

Der Operator  $\hat{C}$  ergibt sich zu

$$\hat{C} = \sum_{\nu} \hat{a}_{\nu}^{\dagger} \hat{a}_{\nu} + |1\rangle\langle 1| + |3\rangle\langle 3|. \quad (1.74)$$

### Das $\Xi$ -System

Die letzte Variante paritätsbehafteter 3NS ist das in Abbildung 1.1c) gezeigte, so genannte  $\Xi$ -System, bei dem die Zustände im Termschema  $\Xi$ -förmig angeordnet sind. Dieses 3NS hat einen Grundzustand  $|1\rangle$  von dem der Übergang zu einem energetisch höheren Zustand  $|2\rangle$  dipolerlaubt ist. Dieser

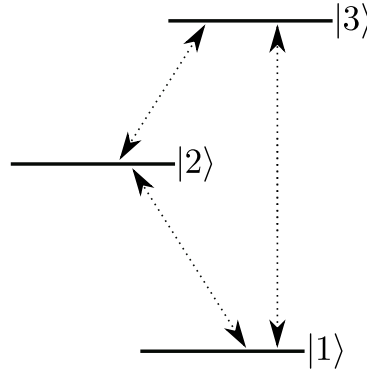


Abbildung 1.2: Ein  $\Delta$ -System. Die Pfeile symbolisieren, dass in diesem System alle Übergänge zwischen den drei Zuständen  $|1\rangle$ ,  $|2\rangle$  und  $|3\rangle$  dipolerlaubt sind.

Zustand kann wiederum in einen energetisch noch höher liegenden Zustand  $|3\rangle$  dipolerlaubt übergehen. Die Hamiltonoperatoren  $\hat{H}_A$  und  $\hat{H}_{LM}$  im Falle des  $\Xi$ -System lauten

$$\hat{H}_A = E_1|1\rangle\langle 1| + (E_1 + E_{21})|2\rangle\langle 2| + (E_1 + 2E_{21} + \delta)|3\rangle\langle 3|, \quad (1.75)$$

$$\hat{H}_{LM} = \sum_{\nu} \left( V_1^{\nu} \left( \hat{a}_{\nu}|2\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 2|\hat{a}_{\nu}^{\dagger} \right) + V_3^{\nu} \left( \hat{a}_{\nu}|3\rangle\langle 2| + |2\rangle\langle 3|\hat{a}_{\nu}^{\dagger} \right) \right), \quad (1.76)$$

mit  $V_1^{\nu} \equiv V_{21}^{\nu}$  und  $V_3^{\nu} \equiv V_{32}^{\nu}$ .

Auch im Falle des  $\Xi$ -System lässt sich ein Anregungszahloperator  $\hat{C}$  definieren

$$\hat{C} = \sum_{\nu} \hat{a}_{\nu}^{\dagger} \hat{a}_{\nu} + |2\rangle\langle 2| + 2|3\rangle\langle 3|. \quad (1.77)$$

Dieser Anregungszahloperator hat eine interessante Struktur: Der atomare Unterraum vom Zustand  $|3\rangle$  trägt mit seiner Besetzung  $\langle |3\rangle\langle 3| \rangle \leq 1$  doppelt zur Gesamtanregungszahl  $\langle \hat{C} \rangle$  bei. Dies liegt daran, dass ein  $\Xi$ -System im Zustand  $|3\rangle$  nur über die Emission von zwei Photonen in seinen Grundzustand  $|1\rangle$  übergehen kann. Der Zustand  $|\{n_{\nu}\}, l\rangle = |0, 3\rangle \equiv |0\rangle \otimes |3\rangle$ , bei dem sich das elektromagnetische Kontinuum im Vakuumzustand  $|0\rangle$  befindet, trägt also zwei Anregungen  $\langle 0, 3|\hat{C}|0, 3\rangle = 2$ . Die Konsequenz hiervon ist, dass der Zustand  $|3\rangle$  im Unterraum einer Anregung,  $\langle \hat{C} \rangle = 1$ , nicht besetzt sein kann. Das  $\Xi$ -System ist in diesem Fall also äquivalent zu einem 2NS mit Übergangsenergie  $E_{21}$  und den Kopplungsstärken  $V_1^{\nu}$ .

### Das $\Delta$ -System

Wenn die Inversionssymmetrie des Hamiltonoperators eines Mehrniveausystems gebrochen ist, lassen sich seinen Eigenzuständen keine wohldefinierten Paritäten zuordnen. Dies hat zur Folge, dass Matrixelemente des Dipoloperators  $\hat{\mathbf{d}}$  aus Gleichung (1.51) nicht mehr paritätsbedingt verschwinden müssen. Solche paritätsfreien Mehrniveausysteme lassen sich zum Beispiel mit Hilfe künstlicher supraleitender Atome realisieren, bei denen die Inversionssymmetrie durch ein angelegtes Magnetfeld gebrochen wird [21]. Im Kontext von 3NS bedeutet dies, dass Übergänge zwischen allen drei Zuständen dipolerlaubt sind.

Ein 3NS, auf welches dies zutrifft, ist in Abbildung 1.2 abgebildet. Es wird als  $\Delta$ -System bezeichnet, da sein Termschema dem Buchstaben  $\Delta$  ähnelt. Diese Topologie des Termschemas hat besondere Auswirkungen: Es lässt sich kein Anregungszahloperator  $\hat{C}$  finden, für den  $\partial_t \langle \hat{C}(t) \rangle$  verschwindet und somit die Anregungszahl  $C$  erhalten ist. Da ich jedoch bei den im Zuge dieser Arbeit genutzten numerischen Verfahren auf die Erhaltung von  $\langle \hat{C} \rangle$  angewiesen bin, behandle ich Mehrniveausysteme, für die kein Anregungszahloperator  $\hat{C}$  existiert, in dieser Arbeit nicht.

## 1.5 Modellierung eindimensionaler Kontinua

### 1.5.1 Photonische Kristalle

Bisher habe ich weder Aussagen über die Bedeutung des Modenindex  $\nu$ , noch welche über das Spektrum  $\omega_\nu$  des elektromagnetischen Kontinuums Gleichung (1.44) getroffen. Das Spektrum  $\omega_\nu$  bestimmt die physikalischen Eigenschaften des Kontinuums und wird über die Eigenwertgleichungen (1.17) beziehungsweise (1.23) und somit letztendlich durch die dielektrische Funktion  $\varepsilon(\mathbf{r})$  und durch die Randbedingungen an die Modenfunktionen  $\mathbf{f}_\nu(\mathbf{r})$  festgelegt. Es scheint mir zweckmäßig, dass ich mich zur Beschreibung eines 1D Wellenleiters an der Beschreibung einer Klasse spezieller dielektrischer Strukturen, den *photonischen Kristallen*, orientiere.

Photonische Kristalle sind dielektrische Festkörper mit periodischer dielektrischer Funktion [26]

$$\varepsilon(\mathbf{r}) = \varepsilon(\mathbf{r} + \mathbf{R}) . \quad (1.78)$$

Hierbei ist  $\mathbf{R}$  ein beliebiger Gittervektor des der Periodizität zugrunde liegenden Bravaisgitters. Nach dem Blochtheorem [27] können die Lösungen der Eigenwertgleichung (1.17) unter Berücksichtigung von Gleichung (1.78) geschrieben werden als

$$\mathbf{f}_\nu(\mathbf{r}) \equiv \mathbf{f}_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \mathbf{u}_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}, \quad \text{mit} \quad \mathbf{u}_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \mathbf{u}_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) . \quad (1.79)$$

Die Funktion  $\mathbf{u}_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  weist die Periodizität der zugrundeliegenden dielektrischen Funktion  $\varepsilon(\mathbf{r})$  aus Gleichung (1.78) auf. Der ursprüngliche Modenindex  $\nu$  ist nun ein Multiindex, dem ein Bandindex  $n$  und ein Wellenvektor  $\mathbf{k}$  zugeordnet wird. Der Bandindex  $n$  resultiert daraus, dass der Wellenvektor  $\mathbf{k}$  im reziproken Raum auf die erste Brillouinzone [27] beschränkt werden kann. Blochperiodische Moden, das heißt Moden wie die  $\mathbf{f}_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  in Gleichung (1.79), die aus dem Produkt einer gitterperiodischen Funktion mit einer ebenen Welle bestehen, werden als *Blochmoden* bezeichnet.

Entsprechend Abbildung 1.3 wird ein photonischer Kristall, der in alle drei Raumrichtungen periodisch ist, als dreidimensionaler (3D) photonischer Kristall bezeichnet. Photonische Kristalle, die in zwei Richtungen beziehungsweise einer Richtung periodisch und in einer Richtung beziehungsweise zwei Richtungen translationsinvariant sind, werden entsprechend zweidimensionale (2D) oder 1D photonische Kristalle genannt. Das Spektrum  $\omega_{n\mathbf{k}}$  eines photonischen Kristalls unendlicher Ausdehnung ist eine kontinuierliche Funktion von  $\mathbf{k}$  innerhalb der ersten Brillouinzone und wird als *Dispersionsrelation* oder auch *Bandstruktur* [26] des photonischen Kristalls bezeichnet. Aufgrund von Bragg-Reflexionen und ähnlicher Mechanismen [26] kann es vorkommen, dass ein photonischer Kristall abhängig von der Richtung der Lichtpropagation eine sogenannte *Bandlücke* [26] aufweist. Damit ist ein Frequenzbereich gemeint, in den kein Band der Dispersionsrelation hineinreicht. Keine elektromagnetische Welle mit einer Frequenz aus der Bandlücke kann in diesem Fall in die entsprechende Richtung propagieren. Gilt

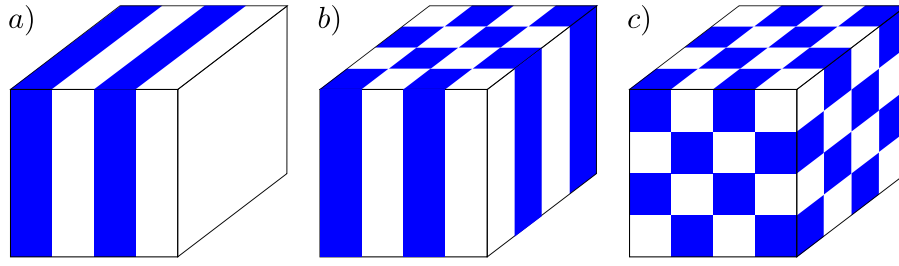


Abbildung 1.3: Beispiele einfacher photonischer Kristalle. Die Bilder zeigen einen a) 1D, b) 2D und c) 3D photonischen Kristall. Die blauen und weißen Bereiche stellen Materialien mit unterschiedlichen Dielektrizitätskonstanten dar. Die Abbildung ist angelehnt an eine Abbildung aus Referenz [26].

dies in einem bestimmten Frequenzbereich für alle periodischen Raumrichtungen eines  $d$ -dimensionalen photonischen Kristalls, spricht man von einer vollständigen  $dD$  Bandlücke.

### 1.5.2 Dispersionsrelationen eindimensionaler Wellenleiter

Abbildung 1.4 zeigt exemplarisch die Dispersionsrelation von zwei Bändern für H-polarisiertes Licht<sup>8</sup> eines 1D Wellenleiters, realisiert als Liniendefekt in einem 2D photonischen Kristall mit vollständiger 2D Bandlücke. Diese beiden Wellenleiterbänder bilden sich als *Defektbänder* entlang des Liniendefekts im Frequenzbereich der Bandlücke des *reinen* 2D photonischen Kristalls aus. Der Verlauf der Kurven in Abbildung 1.4 weist viele Eigenschaften einer generischen Dispersionsrelation auf: Sie verlaufen nichtlinear, weisen abschnittsweise jedoch lineare Verläufe auf und sind nach oben und unten durch Bandkanten beschränkt. Letzteres kann allerdings nur in periodischen Systemen auftreten.

Realistische Wellenleiter in einem physikalischen Labor sind von endlicher Ausdehnung. Daher sind deren Eigenmoden abzählbar. In einem Band der Dispersionsrelation eines realistischen Wellenleiters ist die Anzahl der Moden innerhalb der ersten Brillouinzone somit endlich.

### 1.5.3 Quantenmechanische Beschreibung eines eindimensionalen Wellenleiters im Ortsraum

Im Folgenden beschränke ich mich der Einfachheit halber auf die Beschreibung eines einzelnen Wellenleiterbandes. Motiviert durch die Erkenntnisse aus Abschnitt 1.5.1 lautet der Hamiltonoperator eines solchen Wellenleiters

$$\hat{H}_{\text{EM}} \stackrel{(1.44)}{=} \sum_{k=k_1}^{k_N} \omega_k \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k, \quad (1.80)$$

mit der einbandigen Wellenleiterdispersionsrelation  $\omega_k$ , und  $N$ , der Anzahl der Moden des Bandes innerhalb der ersten Brillouinzone. Die Kreiswellenzahlen dieser Moden sind bezeichnet mit  $k_1$  bis  $k_N$ .

Mit Hilfe einer Gitterfouriertransformation ist es möglich  $\hat{H}_{\text{EM}}$ ,  $\hat{H}_{\text{A}}$  und  $\hat{H}_{\text{LM}}$  in der sogenannten Wannierbasis [30], der Basis räumlich lokalisierter Feldzustände - kurz: im *Ortsraum* - auszudrücken.

<sup>8</sup>Bei H-polarisiertem Licht hat der magnetische Feldvektor  $\mathbf{H}(\mathbf{r}, t)$  zu allen Zeiten nur Komponenten entlang der translationsinvarianten Richtung eines zweidimensionalen Systems.

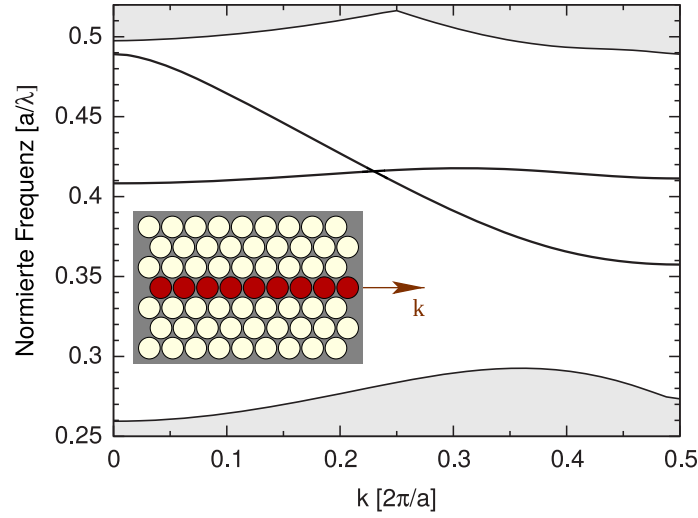


Abbildung 1.4: Dispersionsrelation für H-polarisiertes<sup>8</sup> Licht in einem 1D Wellenleiter auf Basis eines zweidimensionalen photonischen Kristalls. In dem Kristall aus Silizium ( $\epsilon_{\text{Si}} \approx 12$ ) sind Luftporen in einem hexagonalen Gitter angeordnet. Diese Konfiguration weist eine vollständige 2D photonische Bandlücke auf. Eine Reihe der Luftporen, hier rot markiert, ist mit einem Niedrigindexpolymer ( $\epsilon_{\text{Po}} = 2.89$ ) aufgefüllt. Entlang dieser Reihe bilden sich in der 2D Bandlücke zwei 1D Bänder aus. Der graue Bereich der Bandstruktur markiert die Kontinua der Bänder des Kristalls außerhalb der Bandlücke. Adaptiert aus [28–30].

Der Vernichtungsoperator  $\hat{a}_k$  zerlegt sich in

$$\hat{a}_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{x=x_1}^{x_N} e^{-ik(x-x_{\text{ref}})} \hat{a}_x, \quad (1.81)$$

mit  $\hat{a}_x^\dagger$ , dem Vernichter einer photonischen Anregung im um den Ort  $x$  stark lokalisierten Wannierzustand. Die  $N$  Gitterpunkte des Ortsraumgitters sind bezeichnet mit  $x_1$  bis  $x_N$ , der Ort  $x_{\text{ref}}$  ist der Referenzpunkt der Gitterfouriertransformation. Auch für die Operatoren  $\hat{a}_x^\dagger$  und  $\hat{a}_x$  gelten die bosonischen Vertauschungsrelationen, was sich direkt durch Einsetzen von Gleichung (1.81) in Gleichung (1.28) ergibt. Die Wannierbasis bilden die Fockzustände im Ortsraum,

$$|n_{x_1}, n_{x_2}, n_{x_3}, \dots\rangle = |n_{x_1}\rangle \otimes |n_{x_2}\rangle \otimes |n_{x_3}\rangle \dots,$$

die bezüglich  $\hat{a}_x^\dagger$  und  $\hat{a}_x$  alle Eigenschaften der Fockzustände im Impulsraum ( $k$ -Raum) bezüglich  $\hat{a}_k^\dagger$  und  $\hat{a}_k$  aufweisen, vergleiche Abschnitt 1.3.1.

Durch Einsetzen von Gleichung (1.81) in Gleichung (1.80) erhält man den Hamiltonoperator des Wellenleiters im Ortsraum

$$\hat{H}_{\text{EM}} = \sum_{x, x'=x_1}^{x_N} J_{xx'} \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_{x'}, \quad (1.82)$$



mit dem *Hüpfintegral*

$$J_{xx'} = \frac{1}{N} \sum_{k=k_1}^{k_N} \hbar \omega_k e^{ik(x-x')} . \quad (1.83)$$

Es ergibt sich für den Hamiltonoperator der Licht-Materie-Wechselwirkung  $\hat{H}_{\text{LM}}$  im Ortsraum durch Einsetzen von Gleichung (1.81) in Gleichung (1.62)

$$\hat{H}_{\text{LM}} = \sum_{\substack{l, l' > l, \\ p_l \neq p_{l'} \\ E_l - E_{l'} \approx \omega_k}}^{x_N} \sum_{x=x_1}^{x_N} \left( \bar{V}_{ll'}^x \hat{a}_x |l\rangle \langle l'| + \bar{V}_{ll'}^{*x} |l'\rangle \langle l| \hat{a}_x^\dagger \right) , \quad (1.84)$$

mit

$$\bar{V}_{ll'}^x = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k_1}^{k_N} V_{ll'}^k e^{-ik(x-x_{\text{ref}})} . \quad (1.85)$$

Entsprechend Abschnitt 1.4.3 lässt sich ein transformierter Hamiltonoperator

$$\hat{H}_{\text{LM}} = \sum_{\substack{l, l' > l, \\ p_l \neq p_{l'} \\ E_l - E_{l'} \approx \omega_k}}^{x_N} \sum_{x=x_1}^{x_N} V_{ll'}^x \left( \hat{a}_x |l\rangle \langle l'| + |l'\rangle \langle l| \hat{a}_x^\dagger \right) \quad (1.86)$$

finden, dessen Kopplungsstärken  $V_{ll'}^x = |\bar{V}_{ll'}^x|$  auch im Ortsraum rein reell sind.

#### 1.5.4 Ein eindimensionaler Wellenleiter mit Nächste-Nachbar-Wechselwirkung

Setzt man für die Hüpfintegrale  $J_{xx'}$  aus Gleichung (1.83)

$$J_{xx'} = \hbar \omega_0 \delta_{xx'} + J(\delta_{(x+\alpha)x'} + \delta_{(x'+\alpha)x}) , \quad (1.87)$$

mit der Gitterkonstanten des Wellenleiters  $\alpha$ , der Gitterplatzenergie  $\omega_0$  und dem Hüpfparameter  $J$ , ein, so ergibt sich der Hamiltonoperator des Wellenleiters zu

$$\hat{H}_{\text{EM}} = \sum_{x=x_1}^{x_N} \hbar \omega_0 \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_x + J \sum_{x=x_1}^{x_{N-1}} \left( \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_{x+\alpha} + \hat{a}_{x+\alpha}^\dagger \hat{a}_x \right) . \quad (1.88)$$

Der Term  $\propto \omega_0$  in Gleichung (1.88) charakterisiert die Energie einer photonischen Anregung am Ort  $x$ , während die Terme  $\propto J$  eine Nächste-Nachbar-Wechselwirkung (NNWW), also die Kopplung nur direkt benachbarter Ortsraummoden, beschreiben. Daraus ergibt sich durch die Umkehr der Gitterfouriertransformation aus Gleichung (1.81) für das Eigenspektrum von  $\hat{H}_{\text{EM}}$ , beziehungsweise für die Dispersionsrelation  $\omega_k$  eines Wellenleiters mit NNWW,

$$\omega_k = \omega_0 + \frac{2J}{\hbar} \cos(k\alpha) . \quad (1.89)$$

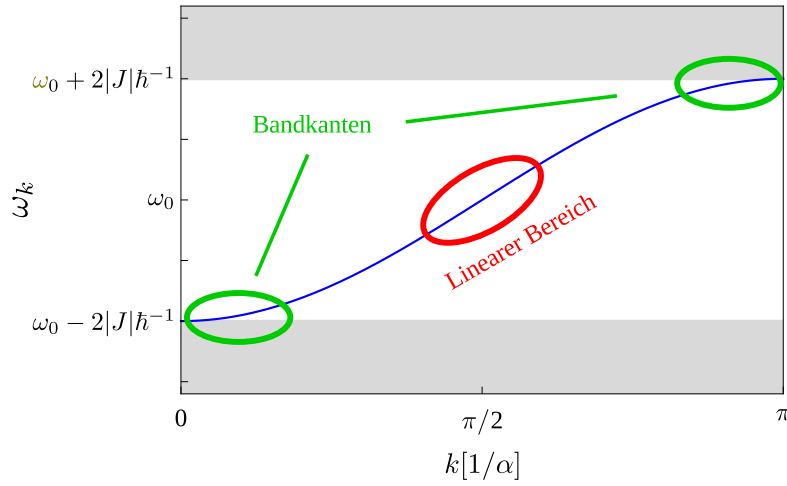


Abbildung 1.5: Cosinusförmige Dispersionsrelation nach Gleichung (1.89) für  $J < 0$ . Der lineare Bereich ist rot markiert, die Bandkanten liegen in den grün markierten Regionen. Im grauen Frequenzbereich, also außerhalb des Bandes, ist keine Lichtpropagation möglich.

Diese cosinusförmige Dispersionsrelation ist für einen rechtshändigen<sup>9</sup> Wellenleiter, also für  $J < 0$ , in Abbildung 1.5 gezeigt. Sie weist sowohl einen linearen Bereich, als auch Bandkanten auf. Die Dispersionsrelation zeigt somit die Eigenschaften einer generischen Dispersionsrelation, wie ich sie in Abschnitt 1.5.2 beschrieben habe. Physikalisch realisiert werden kann ein Wellenleiter mit cosinusförmiger Dispersionsrelation auf Basis gekoppelter Resonatoren, siehe zum Beispiel [32–34].

Die Matrixdarstellung von  $\hat{H}_{\text{EM}}$  aus Gleichung (1.88) ist in der Wannierbasis dünnbesetzt. Dies führt zu Vorteilen bei der numerischen Behandlung dieses Modells mit speziellen, im Falle dünnbesetzter Matrizen sehr performanten numerischen Verfahren, siehe Abschnitt 2.2.2.

<sup>9</sup>In einem rechtshändigen Wellenleiter gilt

$$\text{sgn}(k) = \text{sgn}(\partial_k \omega_k)$$

mit der Vorzeichenfunktion  $\text{sgn}(x)$ . Die Phasengeschwindigkeit  $v_{\text{ph}} = \omega_k/k$  und die Gruppengeschwindigkeit  $v_{\text{gr}} = \partial_k \omega_k$  haben also die gleichen Vorzeichen [31].

# 2 GRUNDLAGEN ZUR NUMERISCHEN SIMULATION ZEITABHÄNGIGER PROZESSE IN DER WELLENLEITER- QUANTENELEKTRODYNAMIK

*In diesem Kapitel beschreibe ich, wie ich das den Untersuchungen in dieser Arbeit zugrunde liegende Programm zur Zeitentwicklung reiner Quantenzustände in WQED Systemen implementiert habe. Hierzu gehe ich zunächst auf die physikalischen Grundlagen der Zeitentwicklung von Zuständen im Schrödingerbild ein. Dann erläutere ich die Grundlagen zur numerischen Näherung von Produkten von Matrixexponentialen mit Vektoren auf Basis so genannter Krylov-Unterraum-Verfahren. Diese Gruppe von Verfahren eignet sich allgemein für die numerische Näherung linearer Abbildungen, bei denen die Abbildung als eine Funktion einer endlichdimensionalen, quadratischen und dünnbesetzten Matrix beschrieben werden kann. Das Produkt des Matrixexponentials einer solchen dünnbesetzten Matrix mit einem Vektor ist ein Beispiel einer solchen linearen Abbildung.*

*Im nächsten Schritt zeige ich, wie sich die Zeitentwicklung von Zuständen in vielen WQED Systemen numerisch mit Hilfe des beschriebenen Krylov-Unterraum-Verfahrens berechnen lässt und welchen Beschränkungen dieses Verfahren unterliegt. Zum Schluss gehe ich auf numerische Experimente ein, die ich zum Test seiner Performanz mit dem von mir geschriebenen Programm durchgeführt habe.*

## 2.1 Zeitentwicklung im Schrödingerbild

Die Dynamik eines quantenmechanischen Systems, beschrieben durch einen Hamiltonoperator  $\hat{H}$ , im Zustand  $|\Psi(t_0)\rangle$  wird im Schrödingerbild<sup>1</sup> durch die Schrödingergleichung [13]

$$i\hbar\partial_t|\Psi(t)\rangle = \hat{H}|\Psi(t)\rangle, \quad (2.1)$$

---

<sup>1</sup>Siehe Abschnitt 1.3.1

bestimmt, welche formal durch

$$|\Psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0)|\Psi(t_0)\rangle \quad (2.2)$$

gelöst wird. Hierbei ist  $\hat{U}(t, t_0)$  ein Zeitentwicklungsoperator, der ebenso die Schrödingergleichung erfüllt [13]. Da  $\hat{H}$  hermitesch ist, ist der Zeitentwicklungsoperator  $\hat{U}(t, t_0)$  unitär, das heißt

$$\hat{U}^{-1}(t, t_0) = \hat{U}^\dagger(t, t_0) \Leftrightarrow \hat{U}^\dagger(t, t_0)\hat{U}(t, t_0) = \mathbf{1}. \quad (2.3)$$

Daraus folgt, dass die Norm  $\langle\Psi(t)|\Psi(t)\rangle$  des Zustandes  $|\Psi(t)\rangle$  für alle Zeiten erhalten ist:

$$\langle\Psi(t)|\Psi(t)\rangle = \langle\Psi(t_0)|\hat{U}^\dagger(t, t_0)\hat{U}(t, t_0)|\Psi(t_0)\rangle \stackrel{(2.3)}{=} \langle\Psi(t_0)|\Psi(t_0)\rangle. \quad (2.4)$$

Außerdem sind alle durch die Schrödingergleichung (2.1) beschriebenen Prozesse reversibel

$$\hat{U}^\dagger(t, t_0) = \hat{U}(t_0, t) \Leftrightarrow |\Psi(t_0)\rangle = \hat{U}(t_0, t)|\Psi(t)\rangle. \quad (2.5)$$

Ist der Systemhamiltonoperator nicht explizit zeitabhängig, ist das betrachtete System abgeschlossen. Dann lautet der Zeitentwicklungsoperator [13]

$$\hat{U}(t, t_0) = \exp\left(\frac{-i\hat{H}(t - t_0)}{\hbar}\right). \quad (2.6)$$

Entwickelt man in diesem Fall den Anfangszustand  $|\Psi(t_0)\rangle$  in die Eigenbasis  $\{|E_i\rangle\}$  des Hamiltonoperators  $\hat{H}$  aus Gleichung (2.1), so ergibt sich

$$|\Psi(t_0)\rangle = \sum_i c_i |E_i\rangle \Leftrightarrow |\Psi(t)\rangle \stackrel{(2.2)(2.6)}{=} \sum_i c_i e^{-i\omega_i(t-t_0)} |E_i\rangle, \quad (2.7)$$

mit den Entwicklungskoeffizienten  $c_i$  und den Kreisfrequenzen  $\omega_i = E_i/\hbar$ . Um die Schrödingergleichung auf diesem Wege zu lösen, ist die Kenntnis des vollen Spektrums und aller Eigenzustände von  $\hat{H}$  vonnöten, der Hamiltonoperator muss dementsprechend diagonalisiert werden.

## 2.2 Numerische Zeitentwicklung reiner Zustände

### 2.2.1 Der „naive“ Ansatz

Das übliche Speicherformat für Gleitkommazahlen mit *doppelter Genauigkeit* (engl. *double precision*) wird nach IEEE<sup>2</sup> Standard *binary64* [35] genannt. Eine Zahl in diesem Format hat einen Speicherbedarf von 8 Byte. Quantenmechanische Problemstellungen sind in einem komplexen Hilbertraum formuliert. Eine komplexe Zahl besteht aus zwei *binary64*-Gleitkommazahlen, benötigt also 16 Byte Speicherplatz.

Der Arbeitsspeicher des Arbeitsplatzrechners, auf dem ich die meisten der in dieser Arbeit präsentierten Simulationen durchgeführt habe, umfasst 32059 Megabyte, das entspricht etwa  $3,36 \times 10^{10}$  Byte. Dieser Arbeitsspeicher bietet also circa  $2,1 \times 10^9$  komplexe Zahlen im *binary64*-Format Platz. Sei die Größe des Hilbertraumes, in dem der Zustand  $|\Psi(t_0)\rangle$  nach Gleichung (2.2) in der Zeit entwickelt

<sup>2</sup>IEEE steht für *The Institute of Electrical and Electronics Engineers, Inc.* .

werden soll,  $n$ , so haben die Matrixdarstellungen des Hamiltonoperators  $\hat{H}$  beziehungsweise des Zeitentwicklungsoperators  $\hat{U}^\dagger(t, t_0)$  jeweils  $n^2$  Einträge. Da es sich hier um eine hermitesche Matrix beziehungsweise das Matrixexponential einer antihermiteschen Matrix handelt, sind  $n(n+1)/2$  dieser Einträge unabhängig. Dadurch ergibt sich eine obere Grenze  $n_{\max}$  für die Größe des Hilbertraumes, sollte für die Berechnung von  $|\Psi(t)\rangle$  mindestens einer der beiden Operatoren explizit im Speicher des Arbeitsplatzrechners vorliegen müssen, zu

$$\frac{n_{\max}(n_{\max} + 1)}{2} \approx 2,1 \times 10^9 \quad \Leftrightarrow \quad n_{\max} \approx 65000. \quad (2.8)$$

Der „naive“ Ansatz zur Berechnung von  $|\Psi(t)\rangle$  nach Gleichung (2.7) besteht darin  $\hat{H}$  direkt numerisch zu diagonalisieren<sup>3</sup>. In diesem Fall muss die Matrixform von  $\hat{H}$  explizit bekannt sein, so dass in diesem Fall die maximale Dimensionalität des Hilbertraumes nach Gleichung (2.8) beschränkt ist. Zur Lösung „größerer“ Probleme mit doppelter Genauigkeit ist der naive Ansatz unbrauchbar und es müssen alternative numerische Verfahren zur Lösung von Gleichung (2.2) gefunden werden.

### 2.2.2 Krylov-Unterraum-Verfahren

Wie ich in Abschnitt 1.5.4 angedeutet habe, sind die Matrixdarstellungen der in dieser Arbeit betrachteten Hamiltonoperatoren  $\hat{H}$  dünnbesetzt. In diesem Fall lässt sich die oben ausgeführte Speicherproblematik durch spezielle Matrixspeicherformate [37, 38] umgehen. Es gibt allerdings eine Klasse iterativer Verfahren, die sogenannten *Krylov-Unterraum-Verfahren*, die sich im Fall dünnbesetzter, großer Matrizen sowohl vom Speicherbedarf, als auch von der Laufzeit gegenüber dem naiven Ansatz als besonders geeignet erweisen. Krylov-Unterraum-Verfahren werden häufig bei der Lösung von großen Eigenwertproblemen [37] oder von linearen Gleichungssystemen [38] angewandt.

Seien  $\underline{\underline{M}} \in \mathbb{C}^{n \times n}$  eine dünnbesetzte Matrix und  $\mathbf{r}_0$  ein Vektor im  $\mathbb{C}^n$ . Das zu lösende Problem sei die Berechnung eines  $n$ -dimensionalen Vektors

$$\mathbf{r}_M = f\left(\underline{\underline{M}}\right)\mathbf{r}_0, \quad (2.9)$$

wobei  $f\left(\underline{\underline{M}}\right)$  eine Funktion der Matrix  $\underline{\underline{M}}$  sei. Ein Krylov-Unterraum-Verfahren beruht auf der iterativen Auswertung von Matrix-Vektor-Produkten, durch die das  $n$ -dimensionale Problem auf einen sogenannten *Krylov-Unterraum*

$$\mathcal{K}_m = \text{span} \left\{ \mathbf{r}_0, \underline{\underline{M}}\mathbf{r}_0, \underline{\underline{M}}^2\mathbf{r}_0, \dots, \underline{\underline{M}}^{m-2}\mathbf{r}_0, \underline{\underline{M}}^{m-1}\mathbf{r}_0 \right\} \quad (2.10)$$

der Dimension  $m \ll n$  projiziert wird. Im Falle dünnbesetzter Matrizen lassen sich Matrix-Vektor-Produkte ressourcenschonend implementieren und ausführen. Insbesondere braucht die betreffende Matrix dabei nicht explizit bekannt, das heißt im Speicher des Rechners vorhanden sein. Es reicht aus, wenn ihre Wirkung  $\underline{\underline{M}}\mathbf{r}$  auf Vektoren  $\mathbf{r} \in \mathbb{C}^n$  als Funktion implementiert wird.

Ein Standardalgorithmus, der bei gegebenen  $\underline{\underline{M}}$  und  $\mathbf{r}_0$  eine orthonormierte Basis

$$\mathcal{V}_m = \{\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_m\} \quad (2.11)$$

<sup>3</sup>Für die direkte, numerische Matrixdiagonalisierung eignen sich zum Beispiel Routinen aus der quelloffenen Softwarebibliothek *LAPACK* [36].

```

v1 := r0/|r0|;
für j = 1 bis m tue
    w := Mvj;
    für i = 1 bis j tue
        hij := vi* · w;
        w := w − hijvi;
    ende
    h(j+1)j := |w|;
    vj+1 := w/h(j+1)j
ende

```

Algorithmus 2.1 : Das Arnoldi-Verfahren als Pseudoquelltext

des  $m$ -dimensionalen Krylov-Unterraumes nach Gleichung (2.10) liefert, ist das *Arnoldi-Verfahren* [37–41], siehe Algorithmus 2.1. Dieses ist ein modifiziertes Gram-Schmidt-Verfahren. Das Arnoldi-Verfahren liefert zudem eine obere Hessenbergmatrix  $\underline{\underline{H}}_m \in \mathbb{C}^{m \times m}$  [37–44] mit

$$\left(\underline{\underline{H}}_m\right)_{ij} = \begin{cases} h_{ij} & \text{aus Algorithmus 2.1 für } i \leq j+1 \leq m, \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (2.12)$$

Für die Elemente  $\mathbf{v}_j$  der Basis  $\mathcal{V}_m$  aus Gleichung (2.11) und den  $h_{ij}$  aus Gleichung (2.12) ergibt sich außerdem aus Algorithmus 2.1

$$\underline{\underline{M}}\mathbf{v}_j = h_{(j+1)j} \mathbf{v}_{j+1} + \sum_{i=1}^j h_{ij} \mathbf{v}_i \quad \text{für } 1 \leq j \leq m. \quad (2.13)$$

Mit  $\underline{\underline{V}}_m = (\mathbf{v}_1 \mathbf{v}_2 \dots \mathbf{v}_m) \in \mathbb{C}^{n \times m}$  und

$$\bar{\underline{\underline{H}}}_m = \begin{pmatrix} \underline{\underline{H}}_m \\ 0 \dots 0 \end{pmatrix}, \quad (2.14)$$

folgt

$$\underline{\underline{M}} \underline{\underline{V}}_m = \underline{\underline{V}}_{m+1} \bar{\underline{\underline{H}}}_m. \quad (2.15)$$

Multipliziert man Gleichung (2.15) mit  $\underline{\underline{V}}_m^\dagger$  von links, so folgt

$$\underline{\underline{V}}_m^\dagger \underline{\underline{M}} \underline{\underline{V}}_m = \underline{\underline{H}}_m. \quad (2.16)$$

Die Matrix  $\underline{\underline{H}}_m$  repräsentiert somit die Projektion der Matrix  $\underline{\underline{M}}$  in den Krylov-Unterraum  $\mathcal{K}_m$  bezüglich der Basis  $\mathcal{V}_m$  [37–42, 45]. Ist  $\underline{\underline{M}}$  antihermitesch, so gilt

$$\underline{\underline{H}}_m = -\underline{\underline{V}}_m^\dagger \underline{\underline{M}}^\dagger \underline{\underline{V}}_m = -\left(\underline{\underline{V}}_m^\dagger \underline{\underline{M}} \underline{\underline{V}}_m\right)^\dagger = -\underline{\underline{H}}_m^\dagger. \quad (2.17)$$

In dem Fall ist also auch  $\underline{\underline{H}}_m$  antihermitesch. Da  $\underline{\underline{H}}_m$  eine obere Hessenbergmatrix ist, kann eine antihermitesche Matrix  $\underline{\underline{H}}_m$  nur eine Tridiagonalmatrix sein.

### Die Approximation des Vektors $\mathbf{r}_M$ im Krylov-Unterraum

Der Vektor  $\mathbf{r}_M$  aus Gleichung (2.9) wird bei der Anwendung eines Krylov-Unterraum-Verfahrens durch

$$\mathbf{r}_M = f\left(\underline{\underline{M}}\right)\mathbf{r}_0 \approx |\mathbf{r}_0| \underline{\underline{V}}_m f\left(\underline{\underline{H}}_m\right) \underline{\underline{V}}_m^\dagger \mathbf{v}_1 = |\mathbf{r}_0| \underline{\underline{V}}_m f\left(\underline{\underline{H}}_m\right) \mathbf{e}_1, \quad (2.18)$$

approximiert. Hierbei ist  $\mathbf{e}_1$  der erste Einheitsvektor im  $\mathbb{C}^m$ . Die Methode ist genau dann von Vorteil, wenn das Arnoldi-Verfahren, Algorithmus 2.1, und die Berechnung des  $m$ -dimensionalen Ausdrucks  $f\left(\underline{\underline{H}}_m\right)\mathbf{e}_1$  zusammen numerisch performanter sind, als die Berechnung des ursprünglichen,  $n$ -dimensionalen Ausdrucks  $f\left(\underline{\underline{M}}\right)\mathbf{r}_0$ .

### 2.2.3 Quantenmechanische Zeitentwicklung mittels eines Krylov-Unterraum-Verfahrens

Seien die Zustände  $|\Psi(t)\rangle$  und  $|\Psi(t_0)\rangle$  desselben Quantensystems zu den Zeitpunkten  $t$  und  $t_0$  und ein nicht explizit zeitabhängiger Hamiltonoperator  $\hat{H}$  aus der Schrödingergleichung (2.1) jeweils repräsentierbar durch die Vektoren  $\Psi(t)$  und  $\Psi(t_0) \in \mathbb{C}^n$  beziehungsweise einer Matrix  $\underline{\underline{H}} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ . Dann lässt sich  $\Psi(t)$  schreiben als

$$\Psi(t) \stackrel{(2.2)(2.6)}{=} \exp\left(\frac{-i\underline{\underline{H}}(t-t_0)}{\hbar}\right) \Psi(t_0), \quad (2.19)$$

Im Rahmen einer Krylov-Unterraum-Methode nach Gleichung (2.18) wird dieser Ausdruck angenähert durch

$$\Psi(t) \approx |\Psi(t_0)| \underline{\underline{V}}_m \exp\left(\frac{-i\underline{\underline{H}}_m(t-t_0)}{\hbar}\right) \mathbf{e}_1. \quad (2.20)$$

Hierzu muss der  $m$ -dimensionale Krylov-Unterraum

$$\mathcal{K}_m = \text{span}\left\{\Psi(t_0), \underline{\underline{H}}\Psi(t_0), \underline{\underline{H}}^2\Psi(t_0), \dots, \underline{\underline{H}}^{m-2}\Psi(t_0), \underline{\underline{H}}^{m-1}\Psi(t_0)\right\}, \quad (2.21)$$

mit Hilfe des Algorithmus 2.1 aufgespannt und orthonormalisiert werden [39–42, 44–46]. Eine wichtige Besonderheit dieses Verfahrens ist, dass für eine hermitesche Matrix  $\underline{\underline{H}}$  der Ausdruck  $i\underline{\underline{H}}$  antihermitesch ist. Für reellwertige  $t$  und  $t_0$  ist damit aufgrund von Gleichung (2.17) auch der Zeitentwicklungsoperator in der Näherung aus Gleichung (2.20) unitär. Dadurch ist die physikalisch so fundamentale Erhaltung von  $\langle\Psi(t)|\Psi(t)\rangle$  im Falle unitärer Zeitentwicklungen auch für alle nach dem hier beschriebenen Verfahren berechneten Näherungslösungen sichergestellt.

### Abschätzung des numerischen Fehlers

Gilt  $m = n$ , so ist  $\underline{\underline{V}}_m$  unitär und die Approximationen in den Gleichungen (2.18) beziehungsweise (2.20) sind exakt und Gleichung (2.16) entspricht einem Basiswechsel. Ist  $m < n$ , so ist in Re-

ferenz [39] eine obere Fehlergrenze  $\varepsilon_m$  für die Approximation für die Zeitentwicklung nach Gleichung (2.20) angeben:

$$\begin{aligned} \varepsilon_m &= \left| \exp\left(\frac{-i\underline{H}(t-t_0)}{\hbar}\right) \underline{\Psi}(t_0) - |\underline{\Psi}(t_0)| \underline{V}_m \exp\left(\frac{-i\underline{H}_m(t-t_0)}{\hbar}\right) \underline{e}_1 \right| \\ &\leq 2|\underline{\Psi}(t_0)| \frac{\kappa^m \exp(\kappa)}{m!}. \end{aligned} \quad (2.22)$$

Hierbei ist

$$\kappa \equiv \frac{|t-t_0|}{\hbar} \|\underline{H}\|_2, \quad (2.23)$$

und  $\|\cdot\|_2$  bezeichnet die Spektralnorm<sup>4</sup> einer Matrix. Mit der Stirlingformel [47]

$$j! \geq \sqrt{2\pi j} \frac{j^j}{e^j}, \quad (2.24)$$

ergibt sich

$$\varepsilon_m \leq 2|\underline{\Psi}(t_0)| \frac{(\kappa \exp(\kappa))^m}{\sqrt{2\pi} m^{m+1/2}} \equiv \frac{\alpha \beta^m}{m^{m+1/2}}, \quad (2.25)$$

mit  $\alpha = 2|\underline{\Psi}(t_0)|/\sqrt{2\pi}$  und  $\beta = \kappa \exp(\kappa)$ . Für superlineare Konvergenz [48] gilt

$$\lim_{j \rightarrow \infty} \frac{|\varepsilon_{j+1}|}{|\varepsilon_j|} = 0. \quad (2.26)$$

Man erhält mit Gleichung (2.25)

$$\begin{aligned} \lim_{m \rightarrow \infty} \frac{|\varepsilon_{m+1}|}{|\varepsilon_m|} &\leq \lim_{m \rightarrow \infty} \frac{\frac{|\alpha||\beta|^{m+1}}{(m+1)^{m+3/2}}}{\frac{|\alpha||\beta|^m}{m^{m+1/2}}} \\ &\leq \lim_{m \rightarrow \infty} \frac{\frac{|\beta|^{m+1}}{m^{m+3/2}}}{\frac{|\beta|^m}{m^{m+1/2}}} \\ &= \lim_{m \rightarrow \infty} \frac{|\beta|}{m} = 0. \end{aligned} \quad (2.27)$$

Bezüglich der Dimension  $m$  des Krylov-Unterraumes erwarte ich somit für die durch Gleichung (2.20) gegebene Näherung aufgrund von Gleichung (2.27) superlineare Konvergenz nach der Definition aus Gleichung (2.26).

<sup>4</sup>Die Spektralnorm einer Matrix  $\underline{A} \in \mathbb{C}^{n \times n}$  ist definiert durch [38]

$$\|\underline{A}\|_2 \equiv \sqrt{\rho(\underline{A}^\dagger \underline{A})},$$

mit dem Spektralradius

$$\rho(\underline{A}) \equiv \max\{|\lambda| \mid \lambda \in \sigma(\underline{A})\}.$$

In dieser Gleichung bezeichnet  $\sigma(\underline{A})$  das Spektrum der Matrix  $\underline{A}$ .



### Lösung des resultierenden dichten Problems

Zur Berechnung der Näherung nach Gleichung (2.20) muss das Exponential der dichtbesetzten Matrix  $-\underline{iH_m}(t - t_0)/\hbar$  bestimmt werden. Hierzu greife ich nicht den naiven Ansatz aus Abschnitt 2.2.1 auf, da dieser darauf beruht, dass die Matrix, deren Exponential berechnet werden soll, diagonalisierbar sein muss. Ist diese Matrix „gerade noch“ diagonalisierbar<sup>5</sup>, kann der naive Ansatz zu großen numerischen Fehlern führen [44].

Ich nähere daher das gesuchte Matrixexponential numerisch durch eine (p,q) Padé-Approximation [41, 44] an:

$$\exp\left(\frac{-\underline{iH_m}(t - t_0)}{\hbar}\right) \approx \frac{N_{pq}\left(-\underline{iH_m}(t - t_0)/\hbar\right)}{D_{pq}\left(-\underline{iH_m}(t - t_0)/\hbar\right)}. \quad (2.28)$$

Hierbei sind  $N_{pq}(x)$  und  $D_{pq}(x)$  Polynome in  $x$  vom Grad  $p$  beziehungsweise  $q$ . Ist  $q = p$ , so ergibt sich für den Spezialfall der Exponentialfunktion [41]

$$\exp(x) \approx \frac{N_{pp}(x)}{N_{pp}(-x)}, \quad (2.29)$$

mit

$$N_{pp}(x) = \sum_{k=0}^p c_k x^k, \quad \text{wobei } c_k = \begin{cases} 1, & \text{für } k = 0, \\ c_{k-1} \frac{p+1-k}{(2p+1-k)k}, & \text{sonst.} \end{cases} \quad (2.30)$$

Laut Referenz [41] führt aufgrund einer Fehlerabschätzung in Referenz [44] die Wahl  $p = 6$  zu einer Ergebnistoleranz der Größenordnung  $10^{-15}$ . Dieser Wert ist von derselben Größenordnung, wie die Genauigkeit einer Gleitkommazahl im binary64-Format [35] und daher in jedem Fall ausreichend.

### Programmbibliothek *Expokit*

Das in diesem Abschnitt vorgestellte Krylov-Unterraum-Verfahren habe ich im Rahmen dieser Arbeit mit Hilfe der FORTRAN77-Programmbibliothek *Expokit* [41] implementiert. *Expokit* stellt Subroutinen zur Berechnung der Näherung aus Gleichung (2.20) und der Páde-Approximation aus Gleichung (2.28) zur Verfügung.

## 2.3 Implementierung des Zeitentwicklungsverfahrens im Kontext der Wellenleiterquantenelektrodynamik

### 2.3.1 Voraussetzungen und der Anregungszahloperator $\hat{C}$

In diesem Abschnitt erläutere ich, wie sich das in Abschnitt 2.2.3 vorgestellte Krylov-Unterraum-Verfahren zur quantenmechanischen Zeitentwicklung im Schrödingerbild auf Systeme der WQED anwenden lässt. Wie ich in Kapitel 1 ausgeführt habe, setzt sich der Hamiltonoperator eines WQED Systems aus drei Komponenten zusammen, nämlich aus dem Hamiltonoperator des freien wellenleitenden

<sup>5</sup>Mit „gerade noch“ diagonalisierbar meine ich, dass der Rang der Matrix zwar gleich ihrer Dimension ist, ihre Determinante jedoch annähernd verschwindet.

Systems  $\hat{H}_{\text{EM}}$ , dem Hamiltonoperator des freien atomaren Systems  $\hat{H}_A$ , und dem Hamiltonoperator der Wechselwirkung zwischen diesen beiden Teilsystemen  $\hat{H}_{\text{LM}}$ . Voraussetzung zur Anwendung des Krylov-Unterraum-Verfahrens nach Gleichung (2.20) ist, dass die Zustandsvektoren  $\Psi(t)$  und  $\Psi(t_0)$  Elemente des *endlichen*  $\mathbb{C}^n$  sind und die Matrix  $\underline{H}$  Element des *endlichen*  $\mathbb{C}^{n \times n}$  ist. Für die quantenmechanischen Operatoren und Zustände „übersetzt“ sich diese Voraussetzung in:

*Die Größe des gemeinsam durch die Zustände  $|\Psi(t_0)\rangle$  und  $|\Psi(t)\rangle$  aus Gleichung (2.2) besetzten Hilbertraumes muss endlich sein. Dazu muss Gleichung (2.6) gelten, mit*

$$\hat{H} = \hat{H}_{\text{EM}} + \hat{H}_A + \hat{H}_{\text{LM}}$$

*für WQED Systeme.*

Bezüglich  $\hat{H}_A$  aus Gleichung (1.48) ergibt sich dazu als notwendige Bedingung, dass die Anzahl der Eigenzustände des Mehrniveausystems endlich ist. Dies läßt sich nach der Anwendung der RWA rechtfertigen, siehe Abschnitt 1.4.4. Genauso ist es notwendig, dass die Anzahl der Eigenmoden in  $\hat{H}_{\text{EM}}$  abzählbar endlich ist. Dies ist für einen einbandigen Wellenleiter endlicher Ausdehnung der Fall, vergleiche Abschnitt 1.5.3. Diese beiden notwendigen Bedingungen sind zusammen mit der folgenden Bedingung an  $\hat{H}_{\text{LM}}$  hinreichend: Es muss ein Anregungszahloperator  $\hat{C}$  der Form

$$\hat{C} = \sum_{\nu} \hat{a}_{\nu}^{\dagger} \hat{a}_{\nu} + \sum_l v_l |l\rangle \langle l|, \quad \text{mit } v_l \in \mathbb{N}_0, \quad (2.31)$$

definiert werden können, der eine Anregungszahl  $\mathcal{C} = \langle \hat{C} \rangle$  als Erhaltungsgröße liefert. In den Abschnitten 1.4.5 und 1.4.6 habe ich bereits Beispiele von Anregungszahloperatoren  $\hat{C}$  für im Rahmen der RWA an ein elektromagnetisches Kontinuum gekoppelte Zwei- und Dreiniveausysteme diskutiert. Um eine Erhaltungsgröße zu beschreiben muss ein Operator mit dem Hamiltonoperator des Gesamtsystems kommutieren. Da der Operator  $\hat{C}$  mit  $\hat{H}_{\text{EM}}$  und  $\hat{H}_A$  in jedem Fall kommutiert, „übersetzt“ sich die letzte Bedingung zu

$$\exists \hat{C} : \quad [\hat{C}, \hat{H}_{\text{LM}}] \equiv 0. \quad (2.32)$$

Eine Möglichkeit die Existenz eines Operators  $\hat{C}$  für ein gegebenes System zu prüfen beziehungsweise den Operator zu erhalten besteht darin, den allgemeinen Ausdruck aus Gleichung (2.31) in Gleichung (2.32) einzusetzen und die resultierenden Gleichungen zu lösen. Existiert eine Lösung, so ergibt sich diese in Abhängigkeit des Koeffizienten vor dem Projektor auf den Grundzustand des Atoms im rechten Term von Gleichung (2.31). Setzt man diesen Koeffizienten gleich Null, so ergibt sich eine Form für den Operator  $\hat{C}$ , wie ich sie durchgängig in dieser Arbeit verwendet habe.

### 2.3.2 Physikalische Deutung des Anregungszahloperators: Die Emissionszahl

Um eine physikalische Deutung des Anregungszahloperators  $\hat{C}$  zu gewinnen, bitte ich den Leser sein Augenmerk erneut auf Gleichung (2.31) zu richten. Der erste Term der rechten Seite dieser Gleichung „zählt“ die Photonen in allen elektromagnetischen Moden des photonischen Subsystems, vergleiche Abschnitt 1.3.1. Jedes Photon im System trägt also mit einer Anregung zur Anregungszahl  $\mathcal{C}$  bei. Der zweite Term auf der rechten Seite der Gleichung (2.31) „zählt“ den Beitrag des atomaren Systems zu  $\mathcal{C}$ . Die ganzzahligen Koeffizienten  $v_l$  in Gleichung (2.31) gewichten den Anteil, mit dem die atomaren

### 2.3 Implementierung des Zeitentwicklungsverfahrens im Kontext der Wellenleiterquantenelektrodynamik

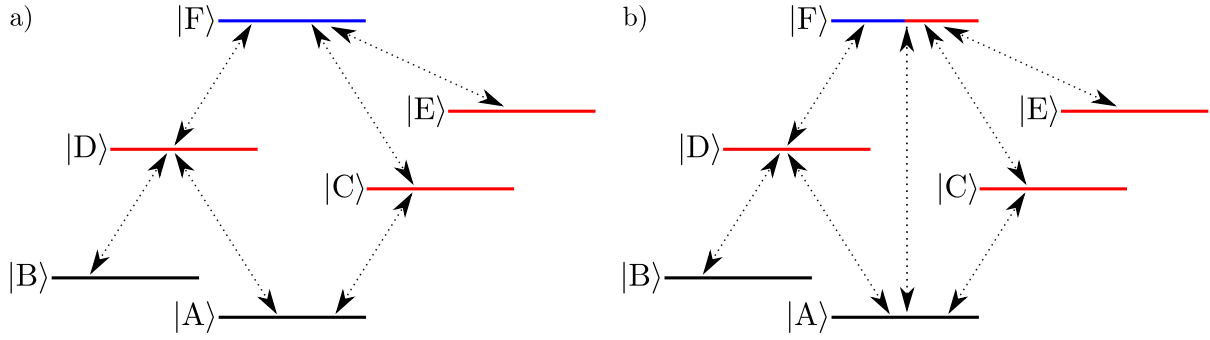


Abbildung 2.1: Zwei Sechsniveausysteme. Dipolerlaubte Übergänge sind an den gepunkteten Pfeilen erkennbar. Die farbliche Kodierung der Zustände gibt deren Emissionszahlen  $v$  an (schwarz:  $v = 0$ , rot:  $v = 1$ , blau:  $v = 2$ ). Die Emissionszahl ist das Gewicht, mit dem ein Zustand zur Anregungszahl beiträgt, siehe Text. In a) lässt sich jedem Zustand eindeutig eine Emissionszahl zuordnen. In b) ist dies für den Zustand  $|F\rangle$  nicht möglich, da für den Übergang zu einem Zustand mit  $v = 0$  Übergangskombinationen mit unterschiedlichen Anzahlen von zusätzlich emittierten Photonen gefunden werden können (zum Beispiel  $|F\rangle \rightarrow |C\rangle \rightarrow |A\rangle$  entspricht der Emission zweier zusätzlicher Photonen,  $|F\rangle \rightarrow |A\rangle$  entspricht der Emission eines zusätzlichen Photons). Somit lässt sich für ein WQED System mit dem Sechsniveausystem aus b) kein Anregungszahloperator  $\hat{C}$  finden.

Zustände  $|l\rangle$  jeweils zu  $\mathcal{C}$  beitragen. Damit ein Operator  $\hat{C}$  existiert, muss also jedem Zustand des atomaren Systems ein solcher Anteil zugeordnet werden können, wobei die Beträge zweier unterschiedlicher Zustände zu  $\mathcal{C}$  durchaus identisch sein dürfen. Ich nenne diesen Anregungszahlbeitrag durch einen atomaren Zustand im Folgenden *Emissionszahl*  $v$ . Ihr Wert entspricht der Zahl der in das elektromagnetische Subsystem zusätzlich, durch den Übergang des Atoms von diesem Zustand in einen mit  $v = 0$ , emittierten Photonen. Zustände mit  $v = 0$  sind vom Rang eines Grundzustandes. Damit meine ich, dass es ausgehend von einem Zustand mit  $v = 0$  keine Kombination von dipolerlaubten Übergängen im Mehrniveausystem gibt, welche die Anzahl der Photonen im elektromagnetischen Subsystem erhöht. In einem Zustand mit  $v = 0$  entspricht die Anregungszahl  $\mathcal{C}$  somit der Anzahl der Photonen im System. Finden sich von einem atomaren Zustand aus mehrere Kombinationen von dipolerlaubten Übergängen, aus denen unterschiedliche Werte für die Emissionszahl resultieren, so lässt sich diesem Zustand keine Emissionszahl zuordnen und es existiert kein Anregungszahloperator für dieses System.

Existiert der Anregungszahloperator  $\hat{C}$  für ein System, dann ist die Konsequenz, dass sich die Emissionszahlen von Zuständen im Termschema des atomaren Systems, zwischen denen Dipolübergänge erlaubt sind, um  $\Delta v = \pm 1$  unterscheiden. Zur Illustration der in diesem Abschnitt gegebenen Definitionen zeigt Abbildung 2.1 Beispiele zweier Sechsniveausysteme. In einem Fall, Abbildung 2.1a), lässt sich jedem Zustand eine Emissionszahl zuordnen. Im anderen Fall, Abbildung 2.1b) ist dies nicht möglich.

### 2.3.3 Hamiltonoperatoren und allgemeine Zustände endlicher Anregungszahl

Ich gebe im Folgenden die allgemeine Form der Hamiltonoperatoren der WQED Systeme in einer Ortsraumformulierung entsprechend den Ausführungen in Abschnitt 1.5.3 an, für die die numerische Behandlung mit dem in Abschnitt 2.2.3 beschriebenen Verfahren möglich ist. Den Hamiltonoperator des Wellenleiters  $\hat{H}_A$  kann ich hierzu uneingeschränkt aus Gleichung (1.82) aus Abschnitt 1.5.3 übernehmen:

$$\hat{H}_{EM} = \sum_{x, x'=x_1}^{x_N} J_{xx'} \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_{x'}. \quad (2.33)$$

Wie in Abschnitt 2.3.1 gefordert, ist die Anzahl der Ortsraummoden endlich.

Den Hamiltonoperator  $\hat{H}_A$  des atomaren Systems aus Gleichung (1.48) formuliere ich um zu

$$\hat{H}_A = \sum_{v=0}^{v_{\max}} \sum_{\{|l\rangle\}_v} E_l |l\rangle \langle l|. \quad (2.34)$$

Der Index  $v$  der ersten Summe in dieser Gleichung läuft über die Emissionszahlen der atomaren Zustände, die zweite Summe läuft über die Menge  $\{|l\rangle\}_v$  der Eigenzustände des Mehrniveausystems mit Emissionszahl  $v$ . Damit die Anzahl atomarer Eigenzustände wie in Abschnitt 2.3.1 gefordert endlich ist, müssen die Mengen  $\{|l\rangle\}_v$  für jedes  $v$  endlich sein.

Ich habe bei Gleichung (2.34) vorausgesetzt, dass sich jedem Zustand des Atoms eine Emissionszahl zuordnen lässt. Dadurch habe ich auch die letzte Bedingung aus Abschnitt 2.3.1 zur Verwendung des Krylov-Unterraum-Verfahrens aus Abschnitt 2.2.3 erfüllt, nämlich dass ein Operator  $\hat{C}$  aus Gleichung (2.31) mit Gleichung (2.32) existieren muss. Der Hamiltonoperator  $\hat{H}_{LM}$  der Licht-Materie-Wechselwirkung aus Gleichung (1.86) lautet dann

$$\hat{H}_{LM} = \sum_{x=x_1}^{x_N} \sum_{v=0}^{v_{\max}-1} \sum_{\substack{\{|l\rangle\}_v \\ \{|m\rangle\}_{v+1}}} \left( V_{ml}^x \hat{a}_x |m\rangle \langle l| + V_{lm}^x |l\rangle \langle m| \hat{a}_x^\dagger \right). \quad (2.35)$$

Diese Darstellung von  $\hat{H}_{LM}$  ist stark an den Anforderungen für die numerische Bearbeitung mittels Krylov-Unterraum-Verfahren orientiert. Es ergibt sich ein weiterer physikalischer Zusammenhang die Emissionszahl betreffend aus dem Vergleich von Gleichung (2.35) mit Gleichung (1.86): Zustände mit gerader beziehungsweise ungerader Emissionszahl weisen jeweils gleiche Paritätseigenwerte auf, vergleiche Abschnitt 1.4.2.

Da die oben angegebenen Hamiltonoperatoren deren allgemeine Formen zur numerischen Behandlung darstellen, gilt für die Gleichungen (2.33) und (2.35), dass hier die Koeffizienten  $J_{xx'}$ ,  $V_{ml}^x$  beziehungsweise  $V_{lm}^x$  angegeben sind, die unter den in Abschnitt 2.3.1 geforderten Bedingungen nicht verschwinden müssen. Diese Koeffizienten *können* allerdings in Abhängigkeit vom betrachteten physikalischen Modell verschwinden. So fallen die meisten der  $J_{xx'}$  aus Gleichung (2.33) im Falle eines Wellenleiters mit NNWW weg, vergleiche Gleichung (1.88) in Abschnitt 1.5.4. Der Operator  $\hat{H}_{EM}$  ist nur dann hermitesch, wenn

$$J_{ij} = J_{ji}^*, \quad \forall i, j \in \{x_1, \dots, x_N\},$$

vergleiche Gleichung (1.83) in Abschnitt 1.5.3. Genauso ist  $\hat{H}_{LM}$  nur dann hermitesch, wenn

$$V_{ml}^x = V_{lm}^{x*},$$

## 2.3 Implementierung des Zeitentwicklungsverfahrens im Kontext der Wellenleiterquantenelektrodynamik

vergleiche Gleichung (1.85) in Abschnitt 1.5.3 beziehungsweise Abschnitt 1.4.3 zu reellen Kopplungskonstanten.

### Ein allgemeiner Zustand mit endlicher Anregungszahl

Ein allgemeiner Zustand  $|\Psi\rangle_Q$  mit  $\mathcal{C} = Q$  Anregungen in einem WQED System beschrieben durch die Gleichungen (2.33) - (2.35) lautet

$$\begin{aligned}
 |\Psi\rangle_Q &= \sum_{\substack{x'=x_1, x^{2'}=x, \dots \\ \dots, x^{Q'}=x^{(Q-1)'}}}^{x_N} \sum_{\{p\}_0} \phi_p^{x' \dots x^{Q'}} \hat{a}_{x'}^\dagger \dots \hat{a}_{x^{Q'}}^\dagger |\mathbf{0}, p\rangle \\
 &+ \sum_{\substack{x'=x_1, x^{2'}=x, \dots \\ \dots, x^{(Q-1)'}=x^{(Q-2)'}}}^{x_N} \sum_{\{r\}_1} \phi_r^{x' \dots x^{(Q-1)'}} \hat{a}_{x'}^\dagger \dots \hat{a}_{x^{(Q-1)'}}^\dagger |\mathbf{0}, r\rangle \\
 &+ \dots \\
 &+ \sum_{x'=x_1}^{x_N} \sum_{\{s\}_{Q-1}} \phi_s^{x'} \hat{a}_{x'}^\dagger |\mathbf{0}, s\rangle + \sum_{\{u\}_Q} \phi_u |\mathbf{0}, u\rangle,
 \end{aligned} \tag{2.36}$$

wobei die  $\phi_m^{x, \dots, x^{W'}}$  jeweils  $W$ -fach bosonisch symmetrisierte Amplitudenkoeffizienten im Unterraum des atomaren Zustandes  $|m\rangle$  darstellen. Anhand von Gleichung (2.36) wird erneut die Struktur des Anregungszahloperators ersichtlich: Im Fall  $\mathcal{C} = Q$  enthält der Basiszustand  $\hat{a}_{x'}^\dagger \dots \hat{a}_{x^{W'}}^\dagger |\mathbf{0}, w\rangle$   $W$  Photonen. Folglich muss der atomare Zustand  $|w\rangle$  die Emissionszahl  $v = Q - W$  aufweisen, denn nach Gleichung (2.31) gilt  $\mathcal{C} = W + v$ .

Es bleibt zu Bemerken, dass die Anregungszahl alleine nicht genügt, um die Größe des Hilbertraumes festzulegen, von dem alle  $Q$ -Anregungszustände nach Gleichung (2.36) Element sind. Hierzu müssen die Anzahlen der elektromagnetischen Moden, sowie der Eigenzustände des Mehrniveausystems bekannt sein.

### 2.3.4 Zustände mit einer und zwei Anregungen und deren vektorielle Repräsentation

Im Rahmen dieser Arbeit habe ich die Zeitentwicklung für Zustände nach (2.36) mit  $\mathcal{C} = 1$  und  $\mathcal{C} = 2$  Anregungen mit dem Krylov-Unterraum-Verfahren aus Abschnitt 2.20 und den Hamiltonoperatoren aus den Gleichungen (2.33) - (2.35) implementiert. Ein allgemeiner Zustand mit einer Anregung schreibt sich nach Gleichung (2.36)

$$|\Psi\rangle_1 = \sum_{x=x_1}^{x_N} \sum_{\{p\}_0} \phi_p^x \hat{a}_x^\dagger |\mathbf{0}, p\rangle + \sum_{\{r\}_1} \phi_r |\mathbf{0}, r\rangle. \tag{2.37}$$

Seien  $P$  und  $R$  jeweils die Anzahlen der Zustände mit Emissionszahl  $v = 0$  beziehungsweise  $v = 1$ . In diesem Fall ist die Dimension  $n_1$  des Hilbertraumes  $\mathcal{H}_1$  der Zustände aus Gleichung (2.37)

$$n_1 = \dim(\mathcal{H}_1) = NP + R. \tag{2.38}$$

## 2 Grundlagen zur numerischen Simulation zeitabhängiger Prozesse in der Wellenleiterquantenelektrodynamik

Als Vektor im  $\mathbb{C}^{n_1}$  lässt sich der allgemeine Zustand mit  $\mathcal{C} = 1$  repräsentieren durch

$$\Psi_1 = \underbrace{\left( \underbrace{\phi_{p_1}^{x_1} \phi_{p_1}^{x_2} \dots \phi_{p_1}^{x_N}}_{N \text{ Elemente}} \underbrace{\phi_{p_2}^{x_1} \dots \phi_{p_P}^{x_N}}_{R \text{ Elemente}} \phi_{r_1} \dots \phi_{r_R} \right)^T}_{\substack{NP \text{ Elemente} \\ (NP+R)=n_1 \text{ Elemente}}} . \quad (2.39)$$

Ein allgemeiner Zustand mit zwei Anregungen schreibt sich nach Gleichung (2.36)

$$|\Psi\rangle_2 = \sum_{\substack{x=x_1 \\ x'=x}}^{x_N} \sum_{\{p\}_0} \phi_p^{xx'} \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_{x'}^\dagger |\mathbf{0}, p\rangle + \sum_{x=x_1}^{x_N} \sum_{\{r\}_1} \phi_r^x \hat{a}_x^\dagger |\mathbf{0}, r\rangle + \sum_{\{s\}_2} \phi_s |\mathbf{0}, s\rangle . \quad (2.40)$$

Die Amplitudenkoeffizienten  $\phi_p^{xx'}$  müssen, um physikalische Zustände zu beschreiben, bezüglich  $x$  und  $x'$  bosonisch symmetrisiert sein

$$\phi_p^{xx'} = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_p^x \varphi_p^{x'} + \psi_p^{x'} \varphi_p^x) & \text{für } x' \neq x, \\ \frac{1}{2}(\psi_p^x \varphi_p^x + \psi_p^x \varphi_p^x) & \text{für } x' = x, \end{cases} \quad (2.41)$$

mit zwei Zusammenstellungen von Einteilchenamplitudenkoeffizienten  $\psi_p^x$  und  $\varphi_p^x$ . Für den Fall  $x' = x$  habe ich in Gleichung (2.41) berücksichtigt, dass der Fockzustand  $\hat{a}_x^\dagger \hat{a}_x^\dagger |\mathbf{0}\rangle$  erst mit einem Vorfaktor  $1/\sqrt{2}$  normiert ist.

Sei  $S$  die Anzahl der Zustände mit Emissionszahl  $v = 2$ , so ist die Dimension  $n_2$  des Hilbertraumes  $\mathcal{H}_2$  der Zustände aus Gleichung (2.40)

$$n_2 = \dim(\mathcal{H}_1) = \frac{N(N+1)}{2}P + NR + S . \quad (2.42)$$

Als Vektor im  $\mathbb{C}^{n_2}$  lässt sich der allgemeine Zustand mit  $\mathcal{C} = 2$  repräsentieren durch

$$\Psi_2 = \underbrace{\left( \underbrace{\phi_{p_1}^{x_1 x_1} \phi_{p_1}^{x_1 x_2} \dots \phi_{p_1}^{x_N x_N}}_{\frac{N(N+1)}{2} \text{ Elemente}} \underbrace{\phi_{p_2}^{x_1 x_1} \phi_{p_2}^{x_1 x_2} \dots \phi_{p_P}^{x_N x_N}}_{NR \text{ Elemente}} \underbrace{\phi_{r_1}^{x_1} \dots \phi_{r_1}^{x_N} \phi_{r_2}^{x_1} \dots \phi_{r_R}^{x_N}}_{S \text{ Elemente}} \phi_{s_1} \dots \phi_{s_S} \right)^T}_{\substack{\frac{N(N+1)}{2} P \text{ Elemente} \\ \left( \frac{N(N+1)}{2} P + NR + S \right) = n_2 \text{ Elemente}}} . \quad (2.43)$$

Dabei werden die ersten  $N(N+1)P/2$  Elemente dieses Vektors zugeordnet durch

$$(\Psi_2)_j = \phi_{p_u}^{x_v x_w}, \quad \text{mit } j = \frac{N(N+1)(u-1) + 2v + w(w-1)}{2} . \quad (2.44)$$

### 2.3.5 Implementierung der Matrix-Vektor-Produkte

Wie in Abschnitt 2.2.2 erwähnt, brauchen die Matrixdarstellungen der Hamiltonoperatoren aus den Gleichungen (2.33) bis (2.35) im  $\mathbb{C}^{n_1 \times n_1}$  beziehungsweise im  $\mathbb{C}^{n_2 \times n_2}$  bei der Verwendung des Arnoldi-Verfahrens, Algorithmus 2.1, für die numerische Zeitentwicklung im Unterraum einer beziehungsweise zweier Anregungen nicht explizit bekannt sein. Es reicht stattdessen die lineare Abbildung zu kennen, die die Multiplikation der Matrixrepräsentanten  $\underline{H}$  der Hamiltonoperatoren mit den Vektorrepräsentanten  $\Psi_1$  beziehungsweise  $\Psi_2$  der Zustände aus den Gleichungen (2.37) und (2.40) erzeugt. Diese gewinnt man durch Anwendung des Hamiltonoperators

$$\hat{H} = \hat{H}_{\text{EM}} + \hat{H}_{\text{A}} + \hat{H}_{\text{LM}}, \quad (2.45)$$

auf die Zustände  $|\Psi\rangle_1$  und  $|\Psi\rangle_2$ . Die entsprechenden Ausdrücke habe ich in Anhang C in Abschnitt C.1 wiedergegeben. Im selben Anhang habe ich in Abschnitt C.2 die daraus resultierenden Algorithmen, die die entsprechenden Matrix-Vektor-Produkte implementieren, angegeben.

### 2.3.6 Abschließende Bemerkungen zur Implementierung

Im Rahmen dieser Arbeit habe ich das in Abschnitt 2.2 vorgestellte Zeitentwicklungsverfahren für WQED Systeme entsprechend meiner Ausführungen in diesem Abschnitt 2.3 in der Programmiersprache C++ [49] implementiert. Dabei habe ich, wie in Abschnitt 2.2.3 erwähnt, die in FORTRAN77 verfügbare Programmbibliothek Expokit [41] in den C++-Programmcode eingebettet.

Für die Lösung dichtbesetzter beziehungsweise dünnbesetzter Eigenwertprobleme habe ich die Programmbibliotheken LAPACK [36] beziehungsweise ARPACK [50] verwendet. Letztere nutzt zur Diagonalisierung das Arnoldi-Verfahren aus Algorithmus 2.1 beziehungsweise andere auf Krylov-Unterräume basierte Verfahren. Um numerische Gitterfouriertransformationen durchzuführen, habe ich die Programmbibliothek FFTW [51] genutzt. Wann immer es möglich war, habe ich die Implementierung der jeweiligen Programmbibliothek aus der MKL von Intel [52] der quelloffenen Variante aus Leistungsgründen vorgezogen.

Als Benutzereingabeschnittstelle habe ich Konfigurationsdateien als Text im XML-Format und, für die Eingabe von Simulationsparametern als Text, in einem selbst entworfenen Format verwendet. Die XML-Dateien werden dabei mit Hilfe des XML-Zerteilers TinyXML [53] eingelesen. Zur Datenausgabe habe ich das Datenformat HDF5 [54] genutzt. Die Daten selbst habe ich zur Aufbereitung mit MATLAB [55] verarbeitet.

Das resultierende Simulationsprogramm habe ich im Rahmen dieser Arbeit geschrieben und genutzt. Es wurde innerhalb der AG TO&P auch ausführlich für eine Diplomarbeit [56] und als Ergänzung im Rahmen einer auf größtenteils analytische Methoden basierenden Dissertation auf dem Gebiet der WQED [57] verwendet.

### 2.3.7 Numerische Experimente

Um das Simulationsprogramm und die oben vorgestellten Verfahren auf Richtigkeit zu prüfen, habe ich zwei Konvergenzstudien durchgeführt. Sei  $\Psi^{m,(p,q),\Delta t}(t_{\text{max}})$  das Resultat einer Simulation der Zeitentwicklung eines Anfangszustandes von  $\Psi(0)$  über einen Zeitraum  $t_{\text{max}}$  mittels des oben beschriebenen Krylov-Unterraum-Verfahrens mit einem Krylov-Unterraum der Dimension  $m$ , einer  $(p, q)$  Padé-

## 2 Grundlagen zur numerischen Simulation zeitabhängiger Prozesse in der Wellenleiterquantenelektrodynamik

Approximation und bei einem verwendeten Simulationszeitschritt  $\Delta t$ . In Letzteren habe ich den Zeitraum  $t_{\max}$  aufgeteilt und die Zeitentwicklung entsprechend iterativ ausgeführt.

Sei  $\Psi^{\text{ref}}(t_{\max})$  eine Referenzlösung zu  $\Psi^{m,(p,q),\Delta t}(t_{\max})$ . Motiviert durch den Ausdruck in Gleichung (2.22) habe ich als Maß für die Konvergenzstudien die Größe

$$\varepsilon_{m,(p,q),\Delta t}(t_{\max}) = \left| \Psi^{m,(p,q),\Delta t}(t_{\max}) - \Psi^{\text{ref}}(t_{\max}) \right| \quad (2.46)$$

verwendet. Ist  $\Psi(0)$  normiert, so entspricht  $\varepsilon_{m,(p,q),\Delta t}(t_{\max})$  der relativen Abweichung des Simulationsergebnisses von der Referenzlösung. Es gilt allgemein: Je kleiner  $\varepsilon_{m,(p,q),\Delta t}(t_{\max})$ , desto kleiner ist die Abweichung des Simulationsergebnisses von der Referenzlösung.

Idealerweise sollte zu einem solchen Vergleich eine analytische Referenzlösung verwendet werden. Die Dimension der Probleme, die das Simulationsprogramm „im Einsatz“ bewältigen soll, sind von der Größenordnung  $10^2$  bis  $10^4$ . Die einzigen mir bekannten quadratischen Matrizen dieser Dimensionen, von denen analytische Ausdrücke ihrer Matrixexponentiale existieren, sind diagonale Matrizen. Als analytisches Referenzmodell verwende ich somit einen diagonalen Hamiltonoperator

$$\hat{H}_I^{\text{ref}} = \sum_{x=x_1}^{x_N} \hbar \omega_x \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_x, \quad \text{mit} \quad \omega_x = \begin{cases} -2\omega_0, & \text{für } x = x_1, \\ \omega_{x_{i-1}} + \frac{4\omega_0}{N} & \text{für } x = x_i \text{ und } 1 < i \leq N. \end{cases} \quad (2.47)$$

Dieser Hamiltonoperator weist im Unterraum einer Anregung ein linear ansteigendes Eigenspektrum von  $-2\hbar\omega_0$  bis  $+2\hbar\omega_0(N-1)N^{-1}$  auf. Als Anfangszustand  $|\Psi_I(0)\rangle$  wähle ich einen normierten, bezüglich der Eigenzustände von  $\hat{H}_I^{\text{ref}}$  gleichverteilten Zustand im Unterraum  $\mathcal{C} = 1$ :

$$|\Psi_I(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{x=1}^{x_N} \hat{a}_x^\dagger |0\rangle. \quad (2.48)$$

In diesem Zustand ist das System im Unterraum einer Anregung energetisch in seiner ganzen Bandbreite besetzt. Die Vektordarstellung  $\Psi_I(0)$  nach Gleichung (2.39) hat die Elemente

$$(\Psi_I(0))_j = \frac{1}{\sqrt{N}}. \quad (2.49)$$

Die Referenzlösung  $|\Psi_I^{\text{ref}}(t_{\max})\rangle$  nach Ablauf einer simulierten Zeit  $t_{\max}$  lautet

$$|\Psi_I^{\text{ref}}(t_{\max})\rangle = e^{-i\frac{\hat{H}_I^{\text{ref}} t_{\max}}{\hbar}} |\Psi_I(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{x=x_1}^{x_N} e^{-i\omega_x t_{\max}} \hat{a}_x^\dagger |0\rangle. \quad (2.50)$$

Die Elemente des Vektors  $\Psi_I^{\text{ref}}(t_{\max})$  der Referenzlösung sind somit

$$(\Psi_I^{\text{ref}}(t_{\max}))_j = \frac{e^{-i\omega_{x_j} t_{\max}}}{\sqrt{N}}. \quad (2.51)$$

Zusätzlich zu der oben vorgestellten, rein analytischen Referenzlösung habe ich für weitere Konvergenzuntersuchungen außerdem noch ein Referenzmodell verwendet, zu dem mir eine semianalytische



### 2.3 Implementierung des Zeitentwicklungsverfahrens im Kontext der Wellenleiterquantenelektrodynamik

Referenzlösung bekannt ist. Der Hamiltonoperator  $\hat{H}_{\text{II}}^{\text{ref}}$  dieses zweiten Referenzmodells ist der des Wellenleiters mit nNWW aus Gleichung (1.88), allerdings mit verschwindender Gitterplatzenergie und mit periodischen Randbedingungen:

$$\hat{H}_{\text{II}}^{\text{ref}} = J \left( \sum_{x=x_1}^{x_N-1} \left( \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_{x+\alpha} + \hat{a}_{x+\alpha}^\dagger \hat{a}_x \right) + \hat{a}_{x_1}^\dagger \hat{a}_{x_N} + \hat{a}_{x_N}^\dagger \hat{a}_{x_1} \right). \quad (2.52)$$

Für diesen Hamiltonoperator sind mir dessen Eigenzustände im Ortsraum nicht explizit bekannt. Ortsraumzustände lassen sich aber über eine Gitterfouriertransformation entsprechend Gleichung (1.81) in die Eigenbasis von  $\hat{H}_{\text{II}}^{\text{ref}}$ , nämlich den  $k$ -Raum, überführen. Außerdem kenne ich das Eigenspektrum dieses Hamiltonoperators im Unterraum einer Anregung. Dieses lautet entsprechend Gleichung (1.89)

$$\hbar\omega_k = 2J \cos(k\alpha), \quad \text{mit } k\alpha \in \left\{ 0, \frac{2\pi}{N}, \dots, \frac{2\pi(N-1)}{N} \right\}. \quad (2.53)$$

Mit diesen Kenntnissen habe ich mir eine Referenzlösung für dieses System folgendermaßen erzeugt: Ich habe den Vektor eines Anfangszustandes  $\Psi_{\text{II}}(0)$  im Ortsraum mittels einer numerischen Gitterfouriertransformation [51] in den  $k$ -Raum überführt. Der so erzeugte Anfangszustand im  $k$ -Raum sei bezeichnet mit  $\Psi_{\text{II},k}(0)$ . Dann ergeben sich die Elemente der Referenzlösung  $\Psi_{\text{II},k}(t_{\text{max}})$  im  $k$ -Raum analog zu Gleichung (2.51)

$$\left( \Psi_{\text{II},k}(t_{\text{max}}) \right)_j = e^{-i \frac{2Jt_{\text{max}}}{\hbar} \cos\left(\frac{2\pi(j-1)}{N}\right)} \left( \Psi_{\text{II},k}(0) \right)_j. \quad (2.54)$$

Den Vektor der Referenzlösung im Ortsraum  $\Psi_{\text{II},k}^{\text{ref}}(t_{\text{max}})$  habe ich dann durch die inverse numerische Gitterfouriertransformation des Vektors  $\Psi_{\text{II},k}(t_{\text{max}})$  erhalten. Als Anfangszustand habe ich eine stark lokalisierte Anregung im Ortsraum an einem festen Ort  $x_\xi$  gewählt

$$|\Psi_{\text{II}}(0)\rangle = \hat{a}_{x_\xi}^\dagger |0\rangle, \quad (2.55)$$

woraus sich die Elemente des Anfangszustandsvektors zu

$$\left( \Psi_{\text{II}}(0) \right)_j = \delta_{j\xi} \quad (2.56)$$

ergeben. Eine solche lokalisierte Anregung im Ortsraum entspricht einer homogenen Besetzung der Zustände im  $k$ -Raum.

Abbildung 2.2a) zeigt die relative Abweichung  $\varepsilon_{m,(6,6),\Delta t}^{\text{I}}(210/\omega_0)$  nach Gleichung (2.46) der numerischen Zeitentwicklung des Zustandsvektors  $\Psi_{\text{I}}(0)$  von der Referenzlösung  $\Psi_{\text{I}}^{\text{ref}}(210/\omega_0)$  aus Gleichung (2.51) in Abhängigkeit des inversen Zeitschritts  $1/\Delta t$  und für verschiedene  $m$  bei  $N = 9999$  und einer (6, 6) Padé-Approximation. Es zeigt sich, dass für inverse Zeitschritte im Bereich  $(\Delta t)^{-1} < \omega_0/7$  die Abweichung  $\varepsilon_{m,(6,6),\Delta t}^{\text{I}}(210/\omega_0)$  in allen Fällen von der Größenordnung 1 ist. In diesem Fall ist der Zeitschritt  $\Delta t$  zu groß gewählt und keine der Lösungen  $\Psi_{\text{I}}^{m,(6,6),\Delta t}(210/\omega_0)$  konvergiert gegen die Referenzlösung. Dies ändert sich für  $\Psi_{\text{I}}^{50,(6,6),\Delta t}(210/\omega_0)$  bei  $(\Delta t)^{-1} = \omega_0/7$ : An dieser Stelle springt  $\varepsilon_{50,(6,6),\Delta t}^{\text{I}}(210/\omega_0)$  um sechs Größenordnungen auf einen Wert im Bereich von  $10^{-6}$  bis

## 2 Grundlagen zur numerischen Simulation zeitabhängiger Prozesse in der Wellenleiterquantenelektrodynamik

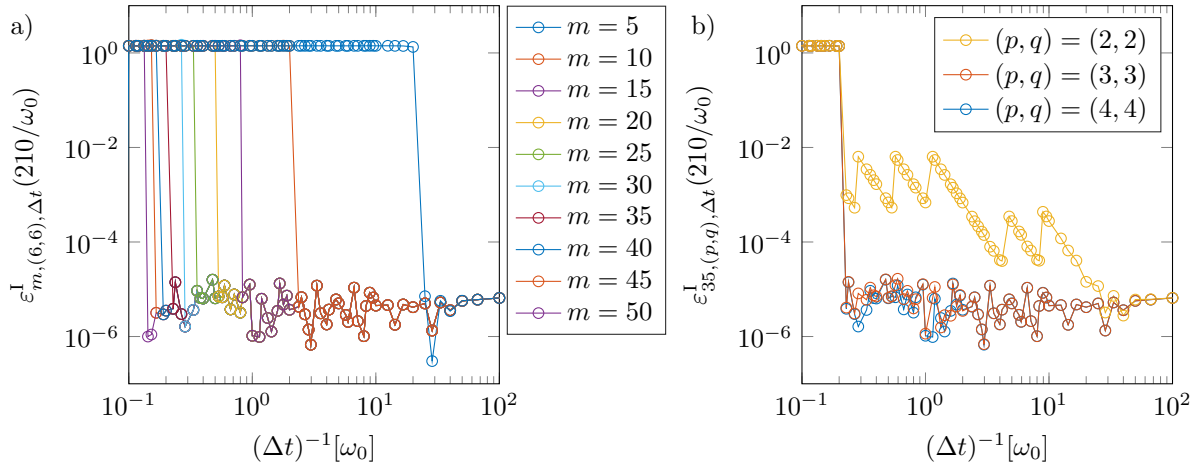


Abbildung 2.2: Relative Abweichungen a)  $\varepsilon_{m,(6,6),\Delta t}^I(210/\omega_0)$  und b)  $\varepsilon_{35,(p,q),\Delta t}^I(210/\omega_0)$  der numerischen Lösungen von der analytischen Referenzlösung aus Gleichung (2.51) über dem verwendeten inversen Zeitschritt  $(\Delta t)^{-1}$ . In a) ist die Abweichung für verschiedene Dimensionen  $m$  des verwendeten Krylov-Unterraumes bei einer (6,6) Padé-Approximation gezeigt. In b) sieht man die Abweichung für verschiedene  $(p, q = p)$  Padé-Approximationen bei  $m = 35$ . In beiden Fällen wurden  $N = 9999$  Eigenmoden verwendet und eine Gesamtzeit  $t_{\max} = 210/\omega_0$  simuliert. Weitere Details siehe Text.

$10^{-5}$ , in dem die Werte von  $\varepsilon_{50,(6,6),\Delta t}^I(210/\omega_0)$  für alle  $(\Delta t)^{-1} > \omega_0/7$  verbleiben. Die numerische Lösung  $\Psi_I^{\text{ref}}(210/\omega_0)$  konvergiert in diesem Bereich gegen die Referenzlösung. Mit steigendem  $(\Delta t)^{-1}$  „springen“ alle weiteren  $\varepsilon_{m,(6,6),\Delta t}^I(210/\omega_0)$  nacheinander mit absteigendem  $m$  in den gleichen Größenordnungsbereich. Dieses Verhalten entspricht meinen Erwartungen, da nach Gleichung (2.22) die numerische Approximation durch das Krylov-Unterraum-Verfahren, siehe Gleichung (2.20), mit steigender Unterraumgröße  $m$  und mit sinkender Zeitschrittlänge  $\Delta t$  besser werden sollte. Dabei dominiert die Abhängigkeit von  $m$  aufgrund der Fakultät in Gleichung (2.22) gegenüber der linearen Abhängigkeit vom Zeitschritt.

Abbildung 2.2b) zeigt die relative Abweichung  $\varepsilon_{35,(p,q),\Delta t}^I(210/\omega_0)$  für eine (2,2), eine (3,3), und eine (4,4) Padé Approximation bei  $m = 35$  und ansonsten gleichen Bedingungen wie im Falle von Abbildung 2.2a). Hier konvergiert  $\Psi_{II}^{\text{ref}}(210/|J|)$  im der Fall der (4,4) Padé-Approximation zuerst, also bei kleinstem  $(\Delta t)^{-1}$ , während die numerische Lösung im Fall der Approximation geringster Ordnung, also der (2,2) Padé-Approximation, zuletzt konvergiert. Die Kurve im Falle der (4,4) Padé-Approximation zeigt dabei genau den selben Verlauf, wie die Kurve im Falle von  $m = 35$  in Abbildung 2.2a), bei der allerdings eine (6,6) Padé-Approximation verwendet wurde. Es hat sich in weiteren numerischen Experimenten bestätigt, dass die Verwendung von  $(p > 4, q = p)$  Padé-Approximationen keine Verbesserung bezüglich der resultierenden Genauigkeit, dagegen aber zu verlängerten Programmlaufzeiten geführt hat.

Die Abbildungen 2.3a) und b) zeigen analog zu den Abbildungen 2.2a) und b) die relativen Abweichungen  $\varepsilon_{m,(6,6),\Delta t}^{II}(210\hbar/|J|)$  beziehungsweise  $\varepsilon_{35,(p,q),\Delta t}^{II}(210\hbar/|J|)$  im Falle des semianalytischen

### 2.3 Implementierung des Zeitentwicklungsverfahrens im Kontext der Wellenleiterquantenelektrodynamik

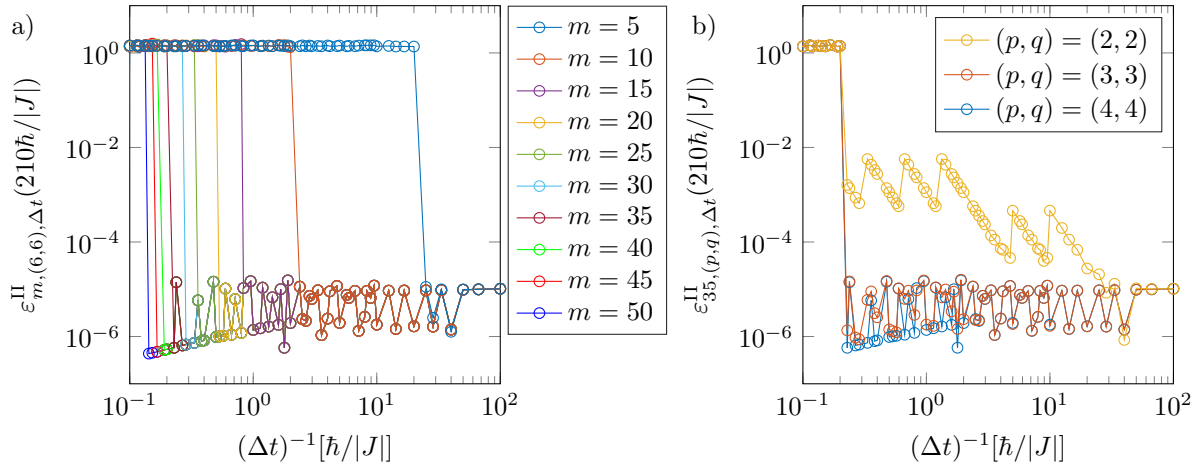


Abbildung 2.3: Relative Abweichungen a)  $\varepsilon_{m,(6,6),\Delta t}^{\text{II}}(210\hbar/|J|)$  und b)  $\varepsilon_{35,(p,q),\Delta t}^{\text{II}}(210\hbar/|J|)$  der numerischen Lösung von der semianalytischen Referenzlösung aus der inversen Gitterfouriertransformierten von Gleichung (2.54) über dem verwendeten inversen Zeitschritt  $(\Delta t)^{-1}$ . Die simulierte Gesamtzeit ist in diesem Fall  $t_{\text{max}} = 210\hbar/|J|$ , der Ort  $x_\xi = 5000\alpha$ . Die restlichen Parameter sind dieselben, wie im Fall von Abbildung 2.2. Weitere Details siehe Text.

Referenzmodells aus den Gleichungen (2.52) bis (2.56). Im Konvergenzverhalten ergeben sich zum vollanalytischen Modell keine signifikanten Unterschiede. Es hat sich außerdem bezüglich der erreichbaren Genauigkeit und dem Konvergenzverhalten bei weiteren numerischen Experimenten in keinem Fall eine Abhängigkeit von der Systemgröße  $N$  gezeigt.

Aufgrund der in diesem Unterabschnitt gewonnenen Erkenntnisse habe ich mich entschieden, die Größe der Krylov-Unterräume in allen im Rahmen dieser Arbeit vorgenommenen Simulationen auf  $m = 35$  festzulegen. Obwohl die Verwendung von  $(p, p)$  Padé-Approximationen mit  $p > 4$  keine Verbesserung der Konvergenzergebnisse erwirkt hat, habe ich für die im Rahmen dieser Arbeit vorgenommenen Simulationen die  $(6, 6)$  Padé-Approximation verwendet. Diese Wahl habe ich aufgrund von Studien der Padé-Approximation aus Referenz [41] getroffen, vergleiche Abschnitt 2.2.3.

Bei den verwendeten Werten von  $m$  beziehungsweise  $p$  und  $q$  erwarte ich somit Konvergenz für Zeitschritte  $\Delta t > 4.375/\omega_{\text{sys}}$ , wobei  $\omega_{\text{sys}}$  die größte charakteristische Frequenz im untersuchten System bezeichnet. Die Wahl kleinerer Zeitschritte verlängert die Programmlaufzeit, bietet jedoch Zugriff auf Zwischenwerte des Systemzustandes in der Simulation. Ich habe daher bei den Untersuchungen im Rahmen dieser Arbeit dann kleinere Zeitschritte gewählt, wenn ich in dem zu untersuchenden System Prozesse auf entsprechend kurzen Zeitskalen beobachten wollte. Ansonsten habe ich den Zeitschritt für die im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Simulationen auf  $\Delta t = 1/\omega_{\text{sys}}$  festgelegt.

Zum Abschluss dieses Kapitels noch eine Anmerkung zur Performanz des Simulationsprogramms: Für eine Rechnung mit dem in diesem Abschnitt vorgestellten, semianalytischen Modell mit einem Anfangszustand entsprechend Gleichung (2.56) und mit den Parametern  $N = 69999$ ,  $x_\xi = 35000\alpha$ ,  $T = 100\hbar/|J|$ ,  $\Delta T = 1\hbar/|J|$ ,  $m = 35$ , und einer  $(6, 6)$  Padé-Approximation benötigt das Simula-

## 2 Grundlagen zur numerischen Simulation zeitabhängiger Prozesse in der Wellenleiterquantenelektrodynamik

tionsprogramm auf dem Arbeitsplatzrechner<sup>6</sup>, auf dem die meisten Simulationen durchgeführt wurden, circa 15 Sekunden. Entsprechend den Ausführungen in Abschnitt 2.2.1 wäre die selbe Rechnung mittels des naiven Ansatzes aufgrund des dabei auftretenden Platzmangels im Hauptspeicher des selben Rechners unmöglich.

---

<sup>6</sup>Der Prozessor des verwendeten Rechners ist ein *Intel® Core™ i7-3930K* mit 6 Kernen und einer Taktfrequenz von 3.2GHz pro Kern, wobei ein Kern für die Rechnung verwendet wurde.

# 3 EINZELPHOTONTRANSPORT IN EINDIMENSIONALEN WELLENLEITERN MIT EINGEBETTETEN DREINIVEAUSYSTEMEN

*In diesem Kapitel diskutiere ich die Transporteigenschaften eines einzelnen Photons in einem 1D Wellenleiter mit einem eingebetteten 3NS. Ich wende Methoden zur Berechnung sowohl stationärer Ebene-Wellen-Lösungen, als auch zeitabhängiger Transportphänomene an, um die Wechselwirkung einzelner Photonen mit ungetriebenen und getriebenen V- und  $\Lambda$ -Systemen zu untersuchen.*

*Im Falle des ungetriebenen V-System analysiere ich das Auftreten vergleichsweise langer Reemissionszeiten des Atoms in den Wellenleiter im Zusammenhang mit „nahezu“ dunklen Zuständen. Beim ungetriebenen  $\Lambda$ -System weise ich die Existenz nichtstationärer dunkler Zustände nach und erkläre, wie die Photontransmission von einer relativen Phasendifferenz der unteren Zustände des  $\Lambda$ -Systems abhängt. Bezüglich getriebener 3NS diskutiere ich elektromagnetisch induzierte Transparenz, sowie eine weitere Form der elektromagnetisch induzierten Beeinflussung der atomaren Streueigenschaften im Kontext der Streuung eines Einzelphotonwellenpakets durch ein  $\Lambda$ -System. Abschließend demonstriere ich, wie sich die Impulsverteilung des gestreuten Photons gezielt durch ein geeignet getriebenes V-Atom beeinflussen lässt. Teile dieses Kapitels wurden in Referenz [58] publiziert.*

## 3.1 Einführung

Das einfachste Modell zur Untersuchung von WQED Effekten ist das an einen 1D Wellenleiter gekoppelte 2NS. Im Kontext solcher Systeme wurde in verschiedenen Arbeiten von sehr interessanten Effekten berichtet, wie der Verwendung des Atoms als energieabhängigen Spiegel [59–62] oder starken Nichtlinearitäten im Wenig-Photon-Sektor [63–69].

Wird das 2NS in diesem Modell durch ein 3NS ersetzt, steigt im Vergleich zum 2NS-Fall die Anzahl physikalischer Phänomene, die durch das Modell beschrieben werden können. Gleichzeitig steigt je-

doch auch die Komplexität der Methoden, die zur Untersuchung des Modells verwendet werden. Schon 3NS im 3D Vakuum weisen interessante physikalische Effekte auf, wie elektromagnetisch induzierte Transparenz (EIT) [70] und die Möglichkeit von adiabatischem Populationstransfer [71], die beide im Zusammenhang einzelner 2NS nicht auftreten können. Eine EIT mit klassischem Licht im Falle eines einzelnen, in ein 1D System eingebetteten Emitters wurde experimentell bereits mit Hilfe supraleitender Bauelemente realisiert [72, 73]. Außerdem befähigt die Möglichkeit ein 3NS elektromagnetisch zu treiben bisweilen dazu, das 3NS im Experiment beliebig zu beeinflussen. Dadurch sind Effekte, die beim 2NS nur unter bestimmten Umständen auftreten, im Labor einfacher zu realisieren. Das Atom als energieabhängigen Spiegel zu nutzen ist hierfür ein Beispiel [74–76].

Stationäre Streueigenschaften von Ebene-Wellen-Zuständen, die ein oder zwei Photonen enthalten, in 1D Wellenleitern mit linearisierten Dispersionsrelationen und eingebetteten getriebenen und ungetriebenen 3NS sind in den Referenzen [77–80] untersucht worden. Dabei wurde EIT für einzelne Photonen und einzelne Atome beschrieben [78, 79] und ein Vorschlag für einen Einzelphotontransistor gemacht [78]. Außerdem wurde die Möglichkeit diskutiert, durch das Atom induzierte, photonische Korrelationen [79, 80] zu erzeugen, ähnlich zur Situation eines eingebetteten 2NS [63, 64, 81].

In diesem Kapitel untersuche ich die Streueigenschaften und die Dynamik einzelner Photonen, die in 1D Wellenleitern mit nichtlinearen Dispersionsrelationen propagieren und in diesen mit einzelnen, getriebenen oder ungetriebenen 3NS wechselwirken. Das Kapitel ist folgendermaßen strukturiert: In Abschnitt 3.2 behandle ich den Transport einzelner Photonen in Wellenleitern mit einem eingebetteten, ungetriebenen 3NS. Dazu präsentiere ich in Abschnitt 3.2.1 zunächst die Grundlagen der hierzu durchgeführten Transportsimulationen. Anschließend diskutiere ich in den Abschnitten 3.2.2 und 3.2.3 die Effekte, die bei ungetriebenen V- und  $\Lambda$ -Systemen auftreten. In Abschnitt 3.3 untersuche ich die Transporteigenschaften von Photonen in einem 1D Wellenleiter mit einem eingebetteten, getriebenen 3NS. Hierfür stelle ich in den Abschnitten 3.3.1 und 3.3.2 kurz die Theorie getriebener 3NS in 1D Wellenleitern vor. Anschließend behandle ich in den Abschnitten 3.3.3 und 3.3.4 jeweils die Transporteigenschaften einzelner Photonen bei in den Wellenleiter eingebetteten, getriebenen  $\Lambda$ - und V-Systemen. Zum Abschluss fasse ich die in diesem Kapitel erlangten Ergebnisse in Abschnitt 3.4 zusammen.

## 3.2 Transport einzelner Photonen in Wellenleitern mit eingebetteten ungetriebenen Dreiniveausystemen

### 3.2.1 Grundlegendes zu den Transportsimulationen

In den folgenden Abschnitten präsentiere ich unter anderem Ergebnisse verschiedener Transportsimulationen von Einzelphotonwellenpaketen in 1D Wellenleitern mit einem eingebetteten 3NS. Dazu habe ich das in Kapitel 2 präsentierte und von mir erstellte Simulationsprogramm verwendet. Der Ablauf dieser Simulationen folgt einem Prinzip, das auch schon bei solchen Transportsimulationen mit in den Wellenleitern eingebetteten 2NS erkenntnisbringend angewendet wurde [46, 62, 66, 67, 81, 82]. Ein allgemeiner Zustand  $|\Psi(t)\rangle$  im Unterraum einer Anregung<sup>1</sup> in einem Wellenleitersystem mit einem

---

<sup>1</sup>Vergleiche Abschnitt 2.3.1

### 3.2 Transport einzelner Photonen in Wellenleitern mit eingebetteten ungetriebenen Dreiniveausystemen

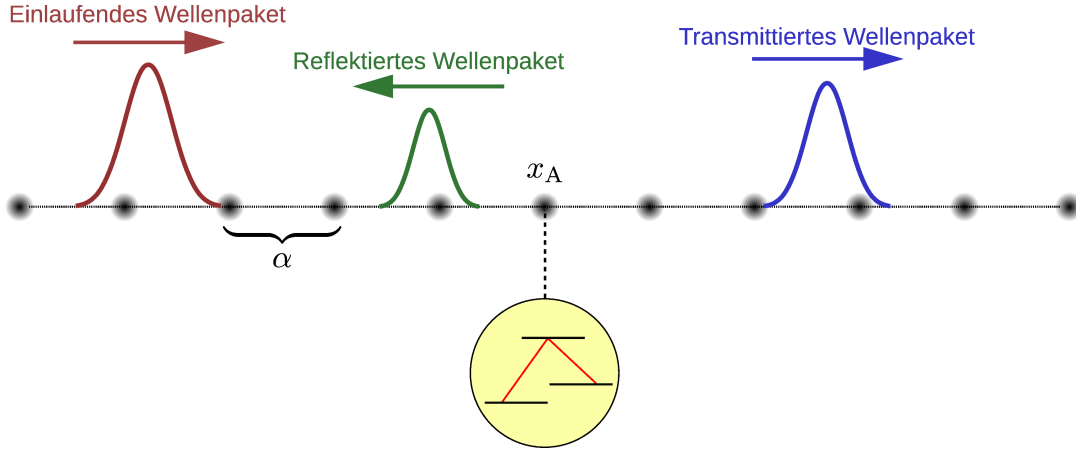


Abbildung 3.1: Das Prinzip der Transportsimulationen: Ein Wellenpaket (rot) propagiert im Wellenleiter von links auf den Gitterplatz  $x_A$  zu, an den das Atom (gelb) gekoppelt ist. Dort wird das Wellenpaket in einen reflektierten Anteil (grün) und einen transmittierten Anteil (blau) gestreut. Die Gitterkonstante des Wellenleiters ist  $\alpha$ .

eingebettetem  $\Lambda$ - beziehungsweise V-System<sup>2</sup> lautet nach Gleichung (2.37)

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{x=x_1}^{x_N} \sum_{|p\rangle} \phi_p^x(t) \hat{a}_x^\dagger |\mathbf{0}, p\rangle + \sum_{|r\rangle} \phi_r(t) |\mathbf{0}, r\rangle, \quad (3.1)$$

wobei  $\begin{cases} |p\rangle \in \{|1\rangle, |3\rangle\} \wedge |r\rangle = |2\rangle, & \text{für ein } \Lambda\text{-System,} \\ |p\rangle = |2\rangle \wedge |r\rangle \in \{|1\rangle, |3\rangle\}, & \text{für ein V-System.} \end{cases}$

Die Bezeichnungen der atomaren Zustände in dieser Gleichung richten sich nach Abbildung 1.1. Bei den Simulationen geht es darum, die Propagation eines Wellenpakets, das genau ein Photon enthält, im Wellenleiter zu untersuchen. Das Wellenpaket soll dabei auf das im Wellenleiter eingebettete 3NS zulaufen, während sich das 3NS im Falle des V-Systems in seinem Grundzustand  $|2\rangle$  beziehungsweise im Falle des  $\Lambda$ -Systems in einer Überlagerung seiner unteren Zustände  $|1\rangle$  und  $|3\rangle$  befindet. Hierbei modelliere ich den Wellenleiter mit NNWW entsprechend Gleichung (1.88) mit perfekt reflektierenden Enden als Randbedingung

$$\hat{H}_{\text{EM}} = \sum_{x=x_1}^{x_N} \hbar\omega_0 \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_x + J \sum_{x=x_1}^{x_{N-1}} \left( \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_{x+\alpha} + \hat{a}_{x+\alpha}^\dagger \hat{a}_x \right). \quad (3.2)$$

In Abbildung 3.1 ist der Ablauf einer Simulation skizziert. Das Wellenpaket läuft von links auf den Gitterplatz  $x_A$  zu, an den das Atom gekoppelt ist. Dort wird es in einen reflektierten und einen transmittierten Anteil gestreut. Die Anzahl der Wellenleitergitterplätze  $N$  und die zu simulierende Zeitspanne  $t_{\text{max}}$  wähle ich bei den Simulationen so, dass zum Zeitpunkt  $t_{\text{max}}$  einerseits die Streuung am Atom

<sup>2</sup>Das  $\Xi$ -System lasse ich hier außer Acht, da es im Unterraum einer Anregung physikalisch äquivalent zu einem 2NS ist, siehe Abschnitt 1.4.6.

vollständig abgeschlossen ist und andererseits der reflektierte und der transmittierte Anteil des Wellenpakets die reflektierenden Enden des Wellenleiters noch nicht erreicht hat. Gleichzeitig soll das Wellenpaket im Anfangszustand nicht mit dem Gitterplatz  $x_A$  überlappen. Die Erfüllung dieser Bedingungen habe ich durch numerische Experimente zu Beginn jeder Simulation sichergestellt. Die Gesamtzahl der Gitterplätze  $N$  wähle ich ungerade mit dem Ort  $x_A$  im Zentrum. Somit ist der Simulationsaufbau symmetrisch, links und rechts von  $x_A$  liegt die gleiche Anzahl von Gitterplätzen.

Observablen, die ich aus den Simulationsdaten berechne, sind zunächst die Besetzungen der atomaren Zustände

$$\langle |l\rangle \langle l|(t) \rangle = \langle \Psi(t) | l \rangle \langle l | \Psi(t) \rangle, \quad \text{mit } l \in \{1, 2, 3\}, \quad (3.3)$$

und die photonische Besetzung eines jeden Ortsraumgitterplatzes  $x$

$$\langle \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_x(t) \rangle = \langle \Psi(t) | \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_x | \Psi(t) \rangle. \quad (3.4)$$

Diese Observablen lassen sich außerdem zur photonischen Besetzung des Ortsraumgitterplatzes  $x$  im Unterraum eines atomaren Zustandes  $|l\rangle$  zusammenfassen:

$$\langle \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_x(t) \rangle_l = \langle \Psi(t) | \hat{a}_x^\dagger | l \rangle \langle l | \hat{a}_x | \Psi(t) \rangle \quad (3.5)$$

Mit Hilfe der Besetzung des Wellenleiters im Ortsraum berechne ich außerdem Transmittanzen  $T$  und Reflektanzen  $R$

$$T = \sum_{x=x_A+1}^{x_N} \langle \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_x(t_{\max}) \rangle + \frac{1}{2} \langle \hat{a}_{x_A}^\dagger \hat{a}_{x_A}(t_{\max}) \rangle, \quad (3.6a)$$

$$R = \sum_{x=x_1}^{x_A-1} \langle \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_x(t_{\max}) \rangle + \frac{1}{2} \langle \hat{a}_{x_A}^\dagger \hat{a}_{x_A}(t_{\max}) \rangle. \quad (3.6b)$$

Dabei spreche ich aufgrund der Symmetrie des Simulationsaufbaus die Besetzung des Ortes  $x_A$  jeweils zur Hälfte der Reflektanz  $R$  und der Transmittanz  $T$  zu. Die Transmittanz  $T_l$  beziehungsweise die Reflektanz  $R_l$  im Unterraum eines atomaren Zustandes  $|l\rangle$  lauten entsprechend

$$T_l = \sum_{x=x_A+1}^{x_N} \langle \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_x(t_{\max}) \rangle_l + \frac{1}{2} \langle \hat{a}_{x_A}^\dagger \hat{a}_{x_A}(t_{\max}) \rangle_l, \quad (3.7a)$$

$$R_l = \sum_{x=x_1}^{x_A-1} \langle \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_x(t_{\max}) \rangle_l + \frac{1}{2} \langle \hat{a}_{x_A}^\dagger \hat{a}_{x_A}(t_{\max}) \rangle_l. \quad (3.7b)$$

Aus der Menge der Besetzungen aller Ortsraumgitterplätze zu einem Simulationszeitpunkt berechne ich außerdem bei Bedarf mittels einer Gitterfouriertransformation die Besetzung des Wellenleiters im  $k$ -Raum  $\langle \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k(t) \rangle$  beziehungsweise  $\langle \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k(t) \rangle_l$ .

#### 3.2.2 Anregung *nahezu* dunkler Zustände bei eingebettetem ungetriebenen V-System

Der Hamiltonoperator  $\hat{H}_A$  des freien, ungetriebenen V-Systems lautet nach Gleichung (1.72)

$$\hat{H}_A = (E_2 + E_{12}) |1\rangle \langle 1| + E_2 |2\rangle \langle 2| + (E_2 + E_{12} + \delta) |3\rangle \langle 3|. \quad (3.8)$$



### 3.2 Transport einzelner Photonen in Wellenleitern mit eingebetteten ungetriebenen Dreinevensystemen

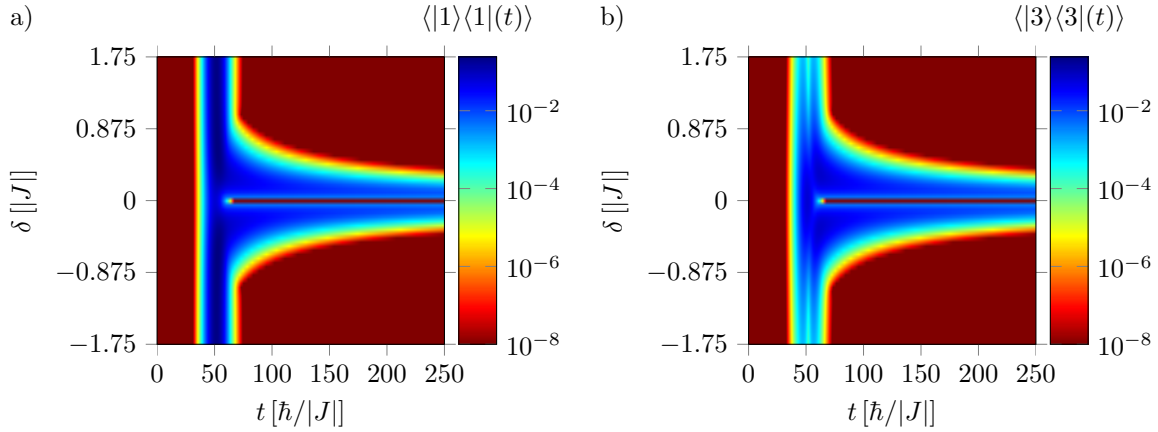


Abbildung 3.2: Besetzung der oberen Zustände a)  $|1\rangle$  und b)  $|3\rangle$  des V-Systems für eine Simulation eines Einzelphotonwellenpakets nach Gleichung (3.10). Die Besetzungen sind gezeigt als Funktionen der Simulationszeit  $t$  und der Verstimmung  $\delta$  der oberen atomaren Niveaus zueinander. Bemerkenswert ist die lange atomare Besetzungszeit für kleine Werte von  $\delta$ . Die Simulationsparameter sind  $J < 0$ ,  $V_1 = V_3 = |J|$ ,  $E_{12} = \hbar\omega_{k_0}$ ,  $\omega_0 = 0$ ,  $k_0 = \pi/(2\alpha)$ ,  $s = 9\alpha$ ,  $x_z = 400\alpha$  und der Wellenleiter wurde durch  $N = 999$  Gitterpunkte modelliert.

Der Hamiltonoperator  $\hat{H}_{\text{LM}}$  der Licht-Materie-Wechselwirkung dieses Systems mit einem 1D Wellenleiter mit NNWW ist

$$\hat{H}_{\text{LM}} \stackrel{(1.73)}{=} \sum_{l=1,3} V_l \left( \hat{a}_{x_A} |l\rangle\langle 2| + |2\rangle\langle l| \hat{a}_{x_A}^\dagger \right). \quad (3.9)$$

Für die Streusimulationen bei diesem System habe ich als Anfangszustand ein Gauß'sches Wellenpaket

$$|\Psi(t_0)\rangle = \sum_{x=x_1}^{x_N} \varphi_x^{k_0, x_z, s} \hat{a}_x^\dagger |0, 2\rangle, \quad \text{mit } \varphi_x^{k_0, x_z, s} \propto e^{-\frac{(x-x_z)^2}{2s^2} + ik_0 x}, \quad (3.10)$$

gewählt. Das Wellenpaket hat die Breite  $s$ , ist zentriert im den Gitterplatz  $x_z$  und propagiert mit der Kreiswellenzahl  $k_0$ .

Die Abbildung 3.2 zeigt die Besetzungen der oberen beiden Zustände  $|1\rangle$  und  $|3\rangle$  des V-Systems über der Simulationszeit  $t$  und der Verstimmung  $\delta$ . Dabei ist die Übergangsenergie  $E_{12}$  als resonant zur Photonenergie  $\hbar\omega_{k_0}$ , mit  $\omega_k$  aus Gleichung (1.89), gewählt. Das Atom befindet sich bis zur Zeit  $t \approx 30\hbar/|J|$  in seinem Grundzustand, zu der dann das Wellenpaket auf das Atom trifft und dessen obere Zustände anregt. Das Photon wird somit teilweise absorbiert und wieder reemittiert, also gestreut. Dabei fällt auf, dass in einem Bereich  $0 < \delta \lesssim 0.875|J|$  die atomare Besetzung viel langsamer wieder abnimmt, als außerhalb dieses Bereichs. Das Photon wird in diesem Parameterbereich also deutlich langsamer reemittiert, als außerhalb. Interessanterweise liegt  $\delta = 0$  außerhalb des erwähnten Bereichs, hier ist der Effekt also nicht nachweisbar. Mit Hilfe numerischer Diagonalisierungen dieses Systems konnte ich zeigen, dass dieses Verhalten des Systems dadurch verursacht wird, dass sich im genannten Bereich unter den Eigenzuständen auch *nahezu* dunkle Zustände (NDZ) finden lassen [83] und bei der Einzelphotonstreuung angeregt sind. In einem NDZ sind die oberen Zustände des V-Systems stark

### 3 Einzelphotontransport in eindimensionalen Wellenleitern mit eingebetteten Dreiniveausystemen

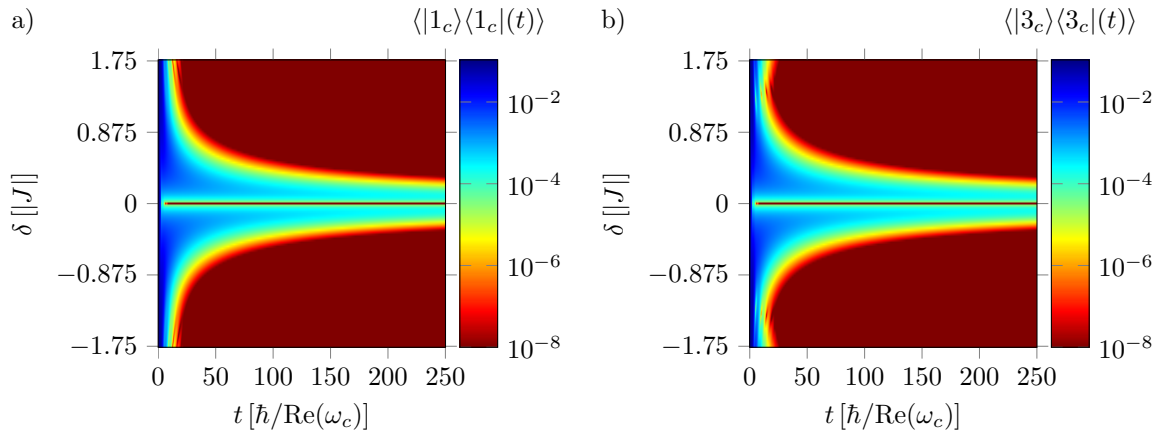


Abbildung 3.3: Besetzung der oberen atomaren Zustände a)  $|1_c\rangle$  und b)  $|3_c\rangle$  bei der Simulation eines V-Systems, das an eine verlustbehaftete Kavität gekoppelt ist. Die Langzeitbesetzung der oberen Zustände kann auch in diesem System vorkommen. Siehe Text für weitere Details. Die Parameter dieser Simulation sind  $V_1 = V_3 = \text{Re}(\omega_c)$ ,  $E_1 = \text{Re}(\omega_c)$  und  $\text{Im}(\omega_c) = -2\text{Re}(\omega_c)$ .

besetzt, während die photonische Besetzung des Wellenleiters nahezu verschwindet. Dies lässt sich folgendermaßen nachvollziehen:

Setzt man den allgemeinen Zustand im Unterraum einer Anregung aus Gleichung (3.1) in die zeitabhängige Schrödingergleichung (1.31) ein, so ergibt sich, ohne Beschränkung der Allgemeinheit, für  $E_2 = 0$

$$i\hbar\partial_t\phi_2^x(t) = J\left(\phi_2^{x-\alpha}(t) + \phi_2^{x+\alpha}(t)\right) + \hbar\omega_0\phi_2^x(t) + V_1\phi_1(t)\delta_{xx_A} + V_3\phi_3(t)\delta_{xx_A}, \quad (3.11a)$$

$$i\hbar\partial_t\phi_1(t) = E_{12}\phi_1(t) + V_1\phi_2^{x_A}(t), \quad (3.11b)$$

$$i\hbar\partial_t\phi_3(t) = (E_{12} + \delta)\phi_3(t) + V_3\phi_2^{x_A}(t), \quad (3.11c)$$

Ist ein NDZ angeregt, so ist die Lichtemission des Atoms in den Wellenleiter „langsam“. Ich nehme an, dass das System in einen Zustand präpariert ist, in dem der Wellenleiter unbesetzt ist

$$\phi_2^x(t_0) = 0 \quad \forall x, \quad (3.12)$$

und sich, wie für einen NDZ gefordert, die Amplitude der Wellenleiterbesetzung am Gitterplatz  $x_A$  zunächst nur langsam verändert, das heißt

$$[\partial_t\phi_2^{x_A}(t)]_{t=t_0} \ll \hbar^{-1}|J|. \quad (3.13)$$

Dann folgt aus Gleichung (3.11a)

$$\phi_1(t_0) \approx -\frac{V_3}{V_1}\phi_3(t_0). \quad (3.14)$$

### 3.2 Transport einzelner Photonen in Wellenleitern mit eingebetteten ungetriebenen Dreiniveausystemen

Setzt man die Gleichungen (3.12) und (3.14) in Gleichung (3.11b) ein, ergibt sich

$$E_{12}\phi_3(t_0) \approx [i\hbar\partial_t\phi_3(t)]_{t=t_0} \stackrel{(3.11c)}{=} (E_{12} + \delta)\phi_3(t_0), \quad (3.15a)$$

$$\Rightarrow E_{12} \approx (E_{12} + \delta) \Rightarrow |\delta| \ll |E_{12}|. \quad (3.15b)$$

Das angeregte Atom emittiert also nur langsam in den Wellenleiter, wenn die Besetzungsamplituden der oberen atomaren Zustände Gleichung (3.14) erfüllen und nach Gleichung (3.15b) die Verstimmung  $\delta$  *nahezu* verschwindet. Die zweite Bedingung erfüllt die oben beschriebene Situation aus Abbildung 3.2, wenn das Atom bei der Photonstreuung das Licht nur langsam wieder reemittiert. Wäre jedoch  $\delta = 0$ , so geht ein NDZ in einen *dunklen Zustand* über. In einem dunklen Zustand ist der Wellenleiter nicht besetzt und die oberen atomaren Zustände angeregt, jedoch kann das Atom aufgrund destruktiver Interferenz zwischen den Besetzungsamplituden der oberen atomaren Zustände nicht in den Wellenleiter emittieren. Das Atom bleibt somit „dunkel“. Dunkle Zustände können daher, im Gegensatz zu den NDZ, bei Streuexperimenten „von außen“ nicht angeregt werden. Daher tritt der oben beschriebene Effekt der langsamen Reemission für  $\delta = 0$  nicht auf.

Bei der obigen Argumentation bin ich nicht auf die Rolle der Besetzungsamplituden des Wellenleiters  $\phi_2^{x \neq x_A}$  eingegangen. Wenn das Atom in den Wellenleiter emittiert, so sorgen die Wellenleitergitterplätze mit  $x \neq x_A$  für den „Abtransport“ der Strahlung von dem Ort des Atoms. Dies lässt sich effektiv als Verlustkanal einer Kavität am Ort  $x_A$ , an die das Atom gekoppelt ist, beschreiben. Daher sollte der Effekt der Langzeitbesetzung der oberen atomaren Zustände auch bei einem vereinfachten Modell eines einzelnen V-Systems, das mit einer verlustbehafteten Kavität wechselwirkt, beobachtbar sein. Die Verluste der Kavität können in diesem Zusammenhang durch einen endlichen, negativen Imaginärteil der „Gitterplatzenergie“  $\hbar\omega_c$  der Kavität modelliert werden. In den Bewegungsgleichungen (3.11) wird der Anteil des Wellenleiters in diesem Modell formal ersetzt durch

$$J\left(\phi_2^{x-\alpha}(t) + \phi_2^{x+\alpha}(t)\right) + \hbar\omega_0\phi_2^x(t) \rightarrow i\text{Im}(\hbar\omega_c)\phi_{2_c}(t) + \text{Re}(\hbar\omega_c)\phi_{2_c}(t). \quad (3.16)$$

Hierin sind die in den beiden Modellen physikalisch korrespondierenden Terme gleichfarbig markiert. Ein allgemeiner Zustand  $|\Theta(t)\rangle$  des vereinfachten Modells im Unterraum einer Anregung lautet

$$|\Theta(t)\rangle = \phi_{2_c}(t)\hat{a}_c^\dagger|0, 2_c\rangle + \phi_{1_c}(t)|0, 1_c\rangle + \phi_{3_c}(t)|0, 3_c\rangle. \quad (3.17)$$

In Abbildung 3.3 sind jeweils die Besetzungen der oberen beiden Zustände  $|1_c\rangle$  und  $|3_c\rangle$  des V-Systems in dem vereinfachten Modell für die atomaren Parameter aus Abbildung 3.2 gezeigt. Der Anfangszustand  $\Theta(t_0)$  für diese Simulation ist  $|\Theta(t_0)\rangle = \hat{a}_c^\dagger|0, 2_c\rangle$ . Wie erwartet zeigt sich auch hier der Effekt der langsamen Reemission des Atoms in die verlustbehaftete Kavität.

An dieser Stelle möchte ich den Leser bitten, sein Augenmerk erneut auf die Gleichungen (3.11) und (3.14) zu richten. Wäre ich bei den Rechnungen in diesem Abschnitt von komplexwertigen Kopplungskonstanten ausgegangen, hätte sich das bei der Ableitung der Gleichungen (3.11) dahingehend ausgewirkt, dass in den Gleichungen (3.11b) und (3.11c) jeweils die komplex konjugierten Kopplungskonstanten eingesetzt wären. Gleichung (3.14) wäre jedoch unverändert. Ich nehme nun komplexwertige Kopplungskonstanten an, also

$$V_l = |V_l|e^{+i\varphi_l}, \quad \text{mit } l \in \{1, 3\}, \quad (3.18)$$

mit einer Phase  $\varphi_l$ . Dann lautet Gleichung (3.14)

$$\phi_1(t_0) \approx \frac{|V_3|}{|V_1|} e^{+i(\varphi_3 - \varphi_1 + \pi)} \phi_3(t_0). \quad (3.19)$$

Die NDZ existieren also auch in diesem System, nur dass sich dann die relative Phase zwischen den Besetzungsamplituden der oberen atomaren Zustände nicht mehr nur um  $\pi$ , sondern zusätzlich um die Phasendifferenz der Kopplungskonstanten  $\varphi_3 - \varphi_1$  unterscheidet. An dem Ergebnis der hier vorgestellten Streusimulationen hätte dies nichts verändert. Dies ist ein Paradebeispiel dafür, dass ich, wie in Anhang B gezeigt, rein reelle Kopplungskonstanten für WQED Systeme von endlicher Hilbertraumdimension annehmen kann, da komplexe Kopplungskonstanten keine neuen, physikalischen Effekte in diesen Systemen erzeugen.

#### 3.2.3 Nichtstationäre dunkle Zustände und phasenabhängige Streueffekte bei eingebettetem ungetriebenen $\Lambda$ -System

Der Hamiltonoperator  $\hat{H}_A$  eines ungetriebenen  $\Lambda$ -Systems lautet nach Gleichung (1.69)

$$\hat{H}_A = E_1 |1\rangle\langle 1| + (E_1 + E_{21}) |2\rangle\langle 2| + (E_1 - \delta) |3\rangle\langle 3|. \quad (3.20)$$

Der Hamiltonoperator  $\hat{H}_{LM}$  der Licht-Materie-Wechselwirkung dieses Systems mit einem 1D Wellenleiter mit NNWW ist

$$\hat{H}_{LM} \stackrel{(1.70)}{=} \sum_{l=1,3} V_l \left( \hat{a}_{x_A} |2\rangle\langle l| + |l\rangle\langle 2| \hat{a}_{x_A}^\dagger \right). \quad (3.21)$$

Das ungetriebene  $\Lambda$ -System weist zwei Zustände vom Rang eines Grundzustandes<sup>3</sup> auf, nämlich  $|1\rangle$  und  $|3\rangle$ . Aus diesem Grund betrachte ich hier zwei verschiedene Konfigurationen von Anfangszuständen:

Den einen Fall, den ich betrachte, bezeichne ich als *Einkanalfall (1KF)*. In dieser Konfiguration befindet sich das Atom zu Beginn der Simulation in einem seiner beiden unteren Zustände. Ohne Beschränkung der Allgemeinheit wähle ich hier den Zustand  $|1\rangle$ . Der von mir verwendete Anfangszustand im 1KF lautet

$$|\Psi(t_0)\rangle = \sum_{x=x_1}^{x_N} \varphi_x^{k_0, x_z, s} \hat{a}_x^\dagger |0, 1\rangle, \quad (3.22)$$

mit dem Gauß'schen Wellenpaket aus Gleichung (3.10).

Die andere von mir untersuchte Konfiguration nenne ich *Zweikanalfall (2KF)*. Dabei befindet sich das Atom zum Simulationsstartzeitpunkt in einer kohärenten Überlagerung seiner unteren beiden Zustände

$$|\Psi(t_0)\rangle = \sum_{x=x_1}^{x_N} \varphi_x^{k_0, x_z, s} \left( \hat{a}_x^\dagger |0, 1\rangle + e^{+i\Delta\varphi} \hat{a}_x^\dagger |0, 3\rangle \right), \quad (3.23)$$

mit dem Gauß'schen Wellenpaket aus Gleichung (3.10). Hierbei ist die relative Phase  $\Delta\varphi$  zwischen den unteren Zuständen ein neuer und, wie ich im Folgenden zeigen werde, wichtiger Systemparameter.

---

<sup>3</sup>Vergleiche Abschnitt 2.3.2.

### 3.2 Transport einzelner Photonen in Wellenleitern mit eingebetteten ungetriebenen Dreiniveausystemen

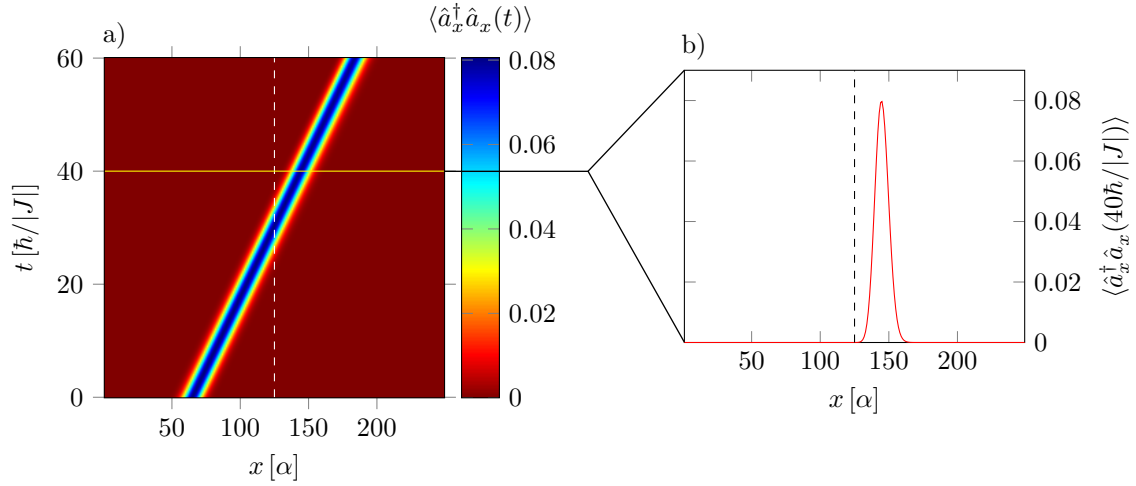


Abbildung 3.4: Besetzung der Wellenleitergitterplätze a) als Funktion der Zeit und b) als Schnappschuss zu einem Zeitpunkt, zu dem das Photon vollständig am Atom vorbei propagiert ist. Der Ort des Atoms ist in beiden Abbildungen durch gestrichelte Linien angedeutet. Das Wellenpaket wird vollständig transmittiert, also ist das System in einem nichtstationären dunklen Zustand, obwohl die Photonenergie in Resonanz mit der Übergangsenergie  $E_{21}$  gewählt ist. Die Parameter dieser Simulation sind  $J < 0$ ,  $\Delta\varphi = \pi$ ,  $V_1 = V_3 = |J|$ ,  $E_{21} = \hbar\omega_{k_0}$ ,  $\delta = 0$ ,  $k_0 = \pi/(2\alpha)$ ,  $s = 7\alpha$ ,  $x_z = 65\alpha$  und der Wellenleiter ist durch  $N = 249$  Gitterplätze modelliert.

Setzt man den allgemeinen Zustand im Unterraum einer Anregung aus Gleichung (3.1) in die zeitabhängige Schrödingergleichung (1.31) ein, so ergibt sich, ohne Beschränkung der Allgemeinheit, für  $E_1 = 0$

$$i\hbar\partial_t\phi_1^x(t) = J\left(\phi_1^{x-\alpha}(t) + \phi_1^{x+\alpha}(t)\right) + \hbar\omega_0\phi_1^x(t) + V_1\phi_2(t)\delta_{xx_A}, \quad (3.24a)$$

$$i\hbar\partial_t\phi_3^x(t) = J\left(\phi_3^{x-\alpha}(t) + \phi_3^{x+\alpha}(t)\right) + (\hbar\omega_0 - \delta)\phi_3^x(t) + V_3\phi_2(t)\delta_{xx_A}, \quad (3.24b)$$

$$i\hbar\partial_t\phi_2(t) = E_{21}\phi_2(t) + V_1\phi_1^{x_A}(t) + V_3\phi_3^{x_A}(t), \quad (3.24c)$$

Die ersten zwei Terme der rechten Seite der Gleichungen (3.24a) und (3.24b) beschreiben eine photonische Anregung im Wellenleiter analog zu Gleichung (3.11a). Im vorliegenden Fall befindet sich das  $\Lambda$ -Atom allerdings entweder im Zustand  $|1\rangle$  oder  $|3\rangle$ . Meine ich die photonische Besetzung des Wellenleiters im Unterraum des Zustands  $|l\rangle$ , so bezeichne ich dies im Folgenden als die photonische Besetzung im Kanal  $l$ .

#### Nichtstationäre dunkle Zustände

In einem dunklen Zustand kann das Licht im Wellenleiter nicht an das Atom koppeln, selbst wenn die Photonenergie die Resonanzbedingung erfüllt. Der angeregte Zustand  $|2\rangle$  des  $\Lambda$ -Atoms ist dann immer

### 3 Einzelphotontransport in eindimensionalen Wellenleitern mit eingebetteten Dreiniveausystemen

und für alle Zeiten unbesetzt, das heißt

$$\partial_t \phi_2(t) = \phi_2(t) = 0 \quad \forall t. \quad (3.25)$$

Mit Gleichung (3.24c) führt dies auf

$$\phi_1^{x_A}(t) = -\frac{V_3}{V_1} \phi_3^{x_A}(t), \quad (3.26)$$

womit sich mit Hilfe der Gleichungen (3.24a) und (3.24b)

$$-\delta \phi_1^{x_A}(t) = J \left( \phi_1^{x_A-\alpha}(t) + \phi_1^{x_A+\alpha}(t) + \frac{V_3}{V_1} \left( \phi_3^{x_A-\alpha}(t) + \phi_3^{x_A+\alpha}(t) \right) \right), \quad (3.27a)$$

$$+\delta \phi_3^{x_A}(t) = J \left( \phi_3^{x_A-\alpha}(t) + \phi_3^{x_A+\alpha}(t) + \frac{V_1}{V_3} \left( \phi_1^{x_A-\alpha}(t) + \phi_1^{x_A+\alpha}(t) \right) \right), \quad (3.27b)$$

ergibt. Die Gleichungen (3.27) erlauben somit auch nichtstationäre dunkle Zustände. Für ein entartetes  $\Lambda$ -System, also für  $\delta = 0$ , ergeben diese Gleichungen

$$\phi_1^{x_A+\alpha}(t) = -\frac{V_3}{V_1} \phi_3^{x_A+\alpha}(t), \quad (3.28a)$$

$$\phi_1^{x_A-\alpha}(t) = -\frac{V_3}{V_1} \phi_3^{x_A-\alpha}(t), \quad (3.28b)$$

was mit den Gleichungen (3.24a) und (3.24b)

$$\phi_1^x(t) = -\frac{V_3}{V_1} \phi_3^x(t), \quad \forall x, \quad (3.29)$$

ergibt. Für den Fall  $V_1 = V_3$  folgt somit aus Gleichung (3.29), dass  $\Delta\varphi = \pi$  als Bedingung für einen nichtstationären dunklen Zustand<sup>4</sup> erfüllt sein muss. Ein Beispiel hierfür ist in den Abbildungen 3.4a) und b) gezeigt.

#### Der Einfluss der Phasendifferenz $\Delta\varphi$ im entarteten 2KF

In diesem Abschnitt untersuche ich den Einfluss der Phasendifferenz  $\Delta\varphi$  auf stationäre Streulösungen und die zeitabhängige Wellenpaketstreuung im 2KF. Zur Ermittlung der Streulösungen folge ich einem Ansatz, der in den Referenzen [60, 61, 78] für ähnliche Systeme erfolgreich angewendet wurde. Dieser besteht in einem zeitharmonischen Ansatz für die Gleichungen (3.24)

$$\phi_2(t) = e^{-i\frac{E_k t}{\hbar}} f_2, \quad (3.30a)$$

$$\phi_l^x(t) = e^{-i\frac{E_k t}{\hbar}} f_l^x, \quad \text{mit } l \in \{1, 3\}, \quad (3.30b)$$

---

<sup>4</sup>Auch hier ist wieder ersichtlich, dass komplexe Kopplungskonstanten nur die Bedingung für  $\Delta\varphi$  im dunklen Zustand geändert hätte. Der physikalische Effekt träte dann jedoch unverändert auf.

### 3.2 Transport einzelner Photonen in Wellenleitern mit eingebetteten ungetriebenen Dreiniveausystemen

mit der Eigenenergie  $E_k$  der stationären Streulösung. Um die gesuchte Lösung für einen 2KF zu finden, benutze ich den Ansatz

$$f_1^x = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}}e^{+ik_{11}\alpha x} + r_{11}e^{-ik_{11}\alpha x} + t_{13}e^{-ik_{13}\alpha x}, & \text{für } x/\alpha < x_A/\alpha, \\ t_{11}e^{+ik_{11}\alpha x} + t_{13}e^{+ik_{13}\alpha x}, & \text{für } x/\alpha > x_A/\alpha, \end{cases} \quad (3.31a)$$

$$f_3^x = \begin{cases} \frac{e^{+i\Delta\varphi}}{\sqrt{2}}e^{+ik_{33}\alpha x} + r_{33}e^{-ik_{33}\alpha x} + t_{31}e^{-ik_{31}\alpha x}, & \text{für } x/\alpha < x_A/\alpha, \\ t_{33}e^{+ik_{33}\alpha x} + t_{31}e^{+ik_{31}\alpha x}, & \text{für } x/\alpha > x_A/\alpha, \end{cases} \quad (3.31b)$$

für die Koeffizienten  $f_{1/3}^x$  in Gleichung (3.30). Ich nehme an, dass für alle Kreiswellenzahlen  $k_{nm}$  in Gleichung (3.31)  $0 \leq k_{nm} \leq \pi/\alpha$  gilt. Bei einem rechtshändigen Wellenleiter, also mit  $J < 0$ , lässt sich dieser Ansatz somit folgendermaßen interpretieren: In beiden Kanälen fallen ebene Wellen jeweils mit den Kreiswellenzahlen  $k_{11}$  und  $k_{33}$  von links auf den Gitterplatz  $x_A$  ein, an dem das  $\Lambda$ -System sitzt. Obwohl diese ebenen Wellen Anteile der „Wellenfunktion“ ein und desselben Photons darstellen, lässt sich deren stationärer Streuprozess als Überlagerung zweier unabhängiger 1KF betrachten. Die in Kanal 1 auf das Atom treffende, ebene Welle, also  $1/\sqrt{2}e^{+ik_{11}\alpha x}$ , wird an dem  $\Lambda$ -System in einen reflektierten und einen transmittierten Anteil im Kanal 1, nämlich  $r_{11}e^{-ik_{11}\alpha x}$  und  $t_{11}e^{+ik_{11}\alpha x}$  in Gleichung (3.31a), und in einen transmittierten und reflektierten Anteil im Kanal 3, nämlich  $t_{31}e^{\pm ik_{31}\alpha x}$  in Gleichung (3.31b), gestreut. In gleicher Weise wird die einfallende ebene Welle in Kanal 3, also  $e^{+i\Delta\varphi}/\sqrt{2}e^{+ik_{33}\alpha x}$ , in beide Kanäle, nämlich in Kanal 3 in  $r_{33}e^{-ik_{33}\alpha x}$  und  $t_{33}e^{+ik_{33}\alpha x}$  in Gleichung (3.31b) und in Kanal 1 in  $t_{13}e^{\pm ik_{13}\alpha x}$ , gestreut.

Die Kreiswellenzahlen in diesen unabhängigen Streuprozessen sind aufgrund der Energieerhaltung verknüpft über

$$\cos(k_{31}\alpha) = \cos(k_{11}\alpha) + \frac{\delta}{2J}, \quad (3.32a)$$

$$\cos(k_{13}\alpha) = \cos(k_{33}\alpha) - \frac{\delta}{2J}. \quad (3.32b)$$

Aus diesem Grund gilt im entarteten Fall mit  $\delta = 0$ , dass  $k_{31} = k_{11}$  und  $k_{13} = k_{33}$ . Die Wellenzahlen  $k_{11}$  und  $k_{33}$  der einfallenden ebenen Wellen sind unabhängig und freie Parameter. Physikalisch bedeutet dies, dass die Impulse desselben Photons in unterschiedlichen atomaren Unterräumen grundsätzlich unabhängig sind. Ich nehme nun an, dass das Photon und das Atom sich vor deren gegenseitiger Wechselwirkung in einem Produktzustand befinden. Dann können sich  $k_{11}$  und  $k_{33}$  nicht unterscheiden und man erhält

$$k_{11} = k_{13} = k_{33} = k_{31} \equiv k. \quad (3.33)$$

Unter diesen Bedingungen lautet der Ansatz aus den Gleichungen (3.31)

$$f_1^x = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}}e^{+ik\alpha x} + r_1e^{-ik\alpha x}, & \text{für } x/\alpha < x_A/\alpha, \\ t_1e^{+ik\alpha x}, & \text{für } x/\alpha > x_A/\alpha, \end{cases} \quad (3.34a)$$

$$f_3^x = \begin{cases} \frac{e^{+i\Delta\varphi}}{\sqrt{2}}e^{+ik\alpha x} + r_3e^{-ik\alpha x}, & \text{für } x/\alpha < x_A/\alpha, \\ t_3e^{+ik\alpha x}, & \text{für } x/\alpha > x_A/\alpha, \end{cases} \quad (3.34b)$$

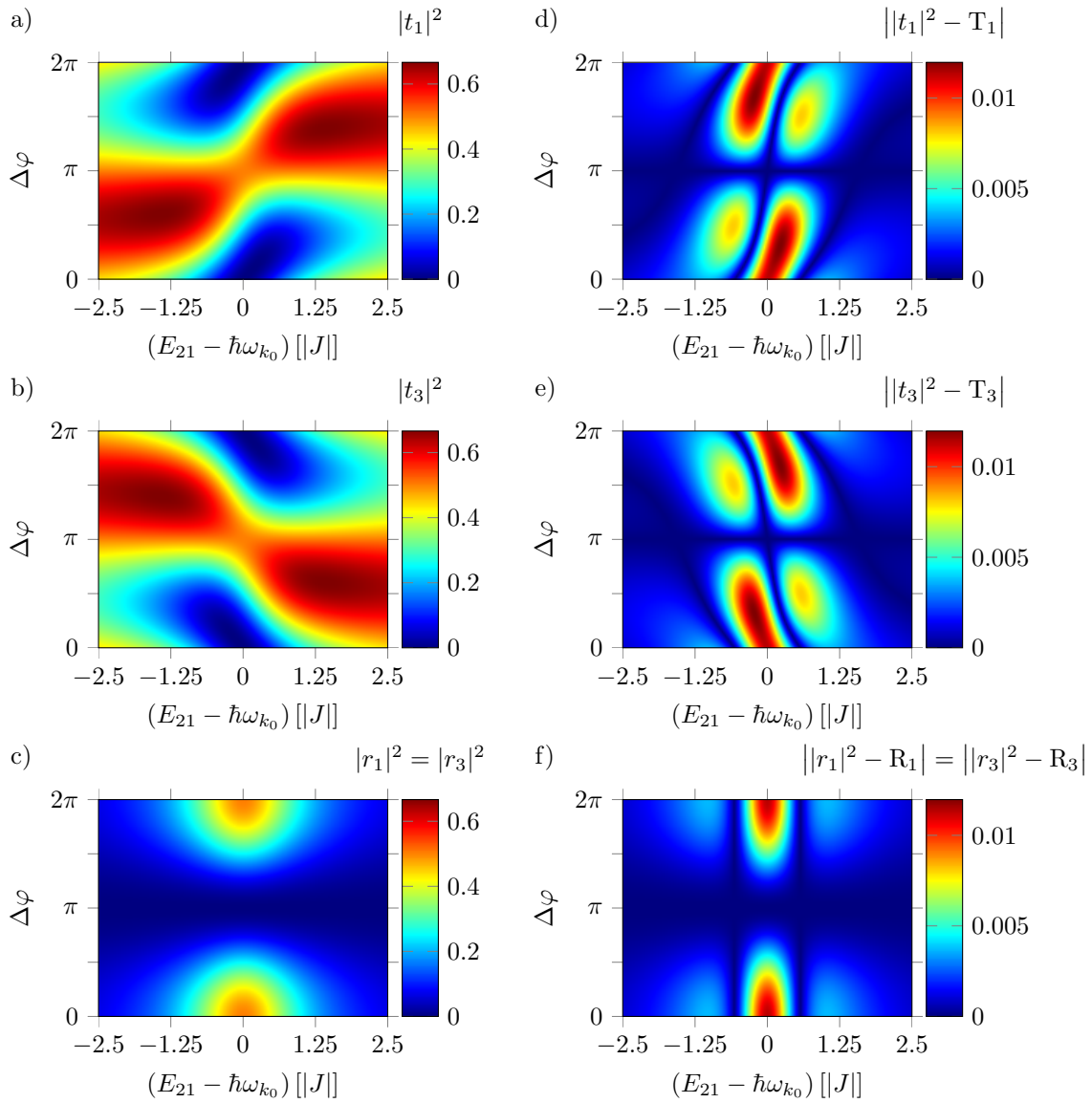


Abbildung 3.5: Streuverhalten eines entarteten  $\Lambda$ -Systems im 2KF: Berechnete Transmittanzen a) im Kanal 1 und b) im Kanal 3 und c) berechnete Reflektanzen in beiden Kanälen als Funktionen der relativen Phase  $\Delta\varphi$  und der Verstimmung  $E_{21} - \hbar\omega_{k_0}$  der Photonenergie  $\hbar\omega_{k_0}$  zur atomaren Übergangsenergie  $E_{21}$ . Im Unterschied zu den Transmittanzen sind die Reflektanzen in beiden Kanälen gleich. Die Abbildungen d) bis f) zeigen die Beträge der Differenzen der analytischen Lösungen zu aus zeitabhängigen Wellenpaketsimulationen gewonnene Daten. Für  $\Delta\varphi = \pi$  verschwinden diese Differenzen vollständig, das System ist dann in einem nichtstationären, dunklen Zustand, vergleiche Abbildung 3.4. Im Allgemeinen unterscheiden sich die Ergebnisse der Simulationen von den analytisch berechneten aufgrund der endlichen spektralen Breite des Wellenpakets. Die Parameter dieser Simulationen sind  $J < 0$ ,  $V_1 = V_3 = |J|$ ,  $E_{21} = 0$ ,  $\delta = 0$ ,  $k_0 = \pi/(2\alpha)$ ,  $s = 9\alpha$ ,  $x_z = 85\alpha$  und der Wellenleiter wurde durch  $N = 299$  Gitterplätze modelliert.



mit

$$r_1 = r_{11} + t_{13} , \quad (3.35a)$$

$$t_1 = t_{11} + t_{13} , \quad (3.35b)$$

$$r_3 = r_{33} + t_{31} , \quad (3.35c)$$

$$t_3 = t_{33} + t_{31} . \quad (3.35d)$$

Setzt man nun die Gleichungen (3.34) zusammen mit dem Ansatz aus Gleichung (3.30) in die Gleichungen (3.24) ein, erhält man

$$r_1 = \frac{-V_1(V_1 + e^{+i\Delta\varphi}V_3)}{\sqrt{2} \left( V_1^2 + V_3^2 - 2iJ(E_{21} - \hbar\omega_k) \sin(k\alpha) \right)} , \quad (3.36a)$$

$$t_1 = \frac{V_3(V_3 - e^{+i\Delta\varphi}V_1) - 2iJ(E_{21} - \hbar\omega_k) \sin(k\alpha)}{\sqrt{2} \left( V_1^2 + V_3^2 - 2iJ(E_{21} - \hbar\omega_k) \sin(k\alpha) \right)} , \quad (3.36b)$$

$$r_3 = \frac{-V_3(V_1 + e^{+i\Delta\varphi}V_3)}{\sqrt{2} \left( V_1^2 + V_3^2 - 2iJ(E_{21} - \hbar\omega_k) \sin(k\alpha) \right)} , \quad (3.36c)$$

$$t_3 = \frac{V_1(e^{+i\Delta\varphi}V_1 - V_3) - 2iJ e^{+i\Delta\varphi}(E_{21} - \hbar\omega_k) \sin(k\alpha)}{\sqrt{2} \left( V_1^2 + V_3^2 - 2iJ(E_{21} - \hbar\omega_k) \sin(k\alpha) \right)} . \quad (3.36d)$$

Die Gleichungen (3.36) lassen sich folgendermaßen interpretieren: Das entartete  $\Lambda$ -System sei zunächst in einer kohärenten Überlagerung seiner unteren Zustände

$$|\Lambda\text{-System}\rangle_{\text{Anfangszustand}} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle + e^{+i\Delta\varphi}|3\rangle) . \quad (3.37)$$

Dann wird ein einzelnes Photon mit Kreiswellenzahl  $k$  am Atom gestreut. Nach der Streuung wird das Photon entweder als reflektiert oder transmittiert detektiert. Im ersten Fall ist der Zustand des Atoms nach der Streuung

$$|\Lambda\text{-System}\rangle_{\text{reflektiertes Photon}} = r_1|1\rangle + r_3|3\rangle . \quad (3.38)$$

Wurde das Photon als transmittiert detektiert, so ergibt sich als Zustand des  $\Lambda$ -Systems nach der Streuung

$$|\Lambda\text{-System}\rangle_{\text{transmittiertes Photon}} = t_1|1\rangle + t_3|3\rangle . \quad (3.39)$$

In der Abbildung 3.5 sind die Transmittanzen  $|t_l|^2$  und Reflektanzen  $|r_l|^2$  für jeden einzelnen Kanal  $l \in \{1, 3\}$ , den Gleichungen (3.36) entsprechend, gezeigt. Außerdem lassen sich aus Abbildung 3.5 die Abweichungen dieser Koeffizienten von den entsprechenden Reflektanzen  $R_l$  und Transmittanzen  $T_l$ , die ich aus Simulationen von Einzelphotonwellenpaketen nach Gleichung (3.23) gewonnen habe, ablesen. Die Kopplungsstärken des Systems, für welches die Abbildung erstellt wurde, habe ich zu  $V_1 = V_3 = |J|$  gewählt. Somit sind die Reflexionskoeffizienten aus den Gleichungen (3.36a) und (3.36c) identisch. Das  $\Lambda$ -System, das anfänglich entsprechend Gleichung (3.37) in einer gleichwertigen Superposition seiner unteren Zustände mit einer Phasendifferenz  $\Delta\varphi$  präpariert war, ist dann nach der Reflexion des Photons weiterhin in einer gleichwertigen Superposition, allerdings mit  $\Delta\varphi = 0$ .

Wenn nun ein zweites Photon mit  $\hbar\omega_k = E_{21}$  auf das  $\Lambda$ -System in einer solchen Superposition mit  $\Delta\varphi = 0$  trifft, wird das Photon entsprechend der Abbildung 3.5 vollständig reflektiert. Dies ist unabhängig von der Energie des ersten Photons. Das Atom wirkt wie ein perfekter Spiegel. Dieses Verhalten ist schon für ähnliche Systeme mit eingebettetem 2NS [59–62] beziehungsweise mit eingebettetem V-System [78] bekannt. Ein ungetriebenes  $\Lambda$ -System kann allerdings nur in einem 2KF als perfekter Spiegel wirken.

Wenn bei der ersten Streuung ein transmittiertes Photon detektiert wird, so kann man den Abbildungen 3.5 entnehmen, dass der Zustand des Atoms stark von der anfänglichen Phasendifferenz  $\Delta\varphi$  aus Gleichung (3.37) abhängt. Obwohl die Transmittanzen  $|t_l|^2$  Maxima aufweisen, wird das Atom nach der Streuung immer in einer Superposition seiner unteren Zustände  $|1\rangle$  und  $|3\rangle$  verbleiben.

### 3.3 Transport einzelner Photonen in Wellenleitern durch stationär getriebene Dreiniveausysteme

#### 3.3.1 Beschreibung stationär getriebener Dreiniveausysteme

In diesem und dem folgenden Abschnitt präsentiere ich die Theorie stationär getriebener 3NS. Hierzu betrachte ich zunächst ein zeitharmonisches, klassisches elektrisches Feld

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_0(\mathbf{r})e^{+i\omega_L t} + \mathbf{E}_0^*(\mathbf{r})e^{-i\omega_L t} \quad (3.40)$$

der Frequenz  $\omega_L$ . Dieses Feld koppelt über die Dipolwechselwirkung<sup>5</sup> an ein freies Dreiniveausystem, innerhalb dessen paritätsbedingt zwei atomare Übergänge dipolerlaubt<sup>6</sup> sind. Der Hamiltonoperator  $\hat{H}_{A,\text{frei}}$  des freien Dreiniveausystems sei

$$\hat{H}_{A,\text{frei}} = \sum_{l=1}^3 E_l |l\rangle\langle l|. \quad (3.41)$$

Ohne Beschränkung der Allgemeinheit seien die dipolerlaubten Übergänge jene zwischen den Zuständen  $|2\rangle$  und  $|1\rangle$  beziehungsweise  $|2\rangle$  und  $|3\rangle$ . Der Hamiltonoperator  $\hat{H}_{A,\text{Feld}}$  der Dipolwechselwirkung zwischen Feld und Atom am Ort  $\mathbf{r}_0$  des als punktförmig<sup>5</sup> genäherten Atoms ergibt sich somit zu<sup>7</sup>

$$\begin{aligned} \hat{H}_{A,\text{Feld}} &= \mathbf{E}(\mathbf{r}_0, t) \cdot (\mathbf{d}_{21}|2\rangle\langle 1| + \mathbf{d}_{21}^*|1\rangle\langle 2| + \mathbf{d}_{23}|2\rangle\langle 3| + \mathbf{d}_{23}^*|3\rangle\langle 2|) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{l=1,3} \left( \left( e^{+i\omega_L t} \hbar\Omega_{2l}^- + e^{-i\omega_L t} \hbar\Omega_{2l}^+ \right) |2\rangle\langle l| + \text{h.c.} \right), \end{aligned} \quad (3.42)$$

mit den Dipolmatrixelementen  $\mathbf{d}_{kl} = \langle k|\hat{\mathbf{d}}|l\rangle$  und den Rabifrequenzen

$$\Omega_{2l}^- = \frac{2\mathbf{E}_0(\mathbf{r}_0) \cdot \mathbf{d}_{2l}}{\hbar}, \quad (3.43a)$$

$$\Omega_{2l}^+ = \frac{2\mathbf{E}_0^*(\mathbf{r}_0) \cdot \mathbf{d}_{2l}}{\hbar}. \quad (3.43b)$$

<sup>5</sup>Vergleiche Abschnitt 1.4.2

<sup>6</sup>Vergleiche Abschnitt 1.4.6.

<sup>7</sup>Vergleiche Gleichung (1.52)

### 3.3 Transport einzelner Photonen in Wellenleitern durch stationär getriebene Dreiniveausysteme

Um die RWA<sup>8</sup> anwenden zu können, transformiere ich  $\hat{H}_A = \hat{H}_{A,\text{frei}} + \hat{H}_{A,\text{Feld}}$  in das Wechselwirkungsbild, wobei ich als Wechselwirkungsterm den zeitabhängigen Operator  $\hat{H}_{A,\text{Feld}}$  wähle,

$$\begin{aligned}\hat{H}_{A,\text{Feld}}^{\text{WW}} &= e^{+i\sum_{l=1}^3 E_l |l\rangle\langle l| \frac{t}{\hbar}} \hat{H}_{A,\text{Feld}} e^{-i\sum_{l=1}^3 E_l |l\rangle\langle l| \frac{t}{\hbar}} \\ &= \frac{1}{2} \left( \sum_{l=1}^3 \left( e^{-i(E_l - E_2 - \hbar\omega_L)\frac{t}{\hbar}} \hbar\Omega_{2l}^- + e^{-i(E_l - E_2 + \hbar\omega_L)\frac{t}{\hbar}} \hbar\Omega_{2l}^+ \right) |2\rangle\langle l| + \text{h.c.} \right). \quad (3.44)\end{aligned}$$

Sei nun der Fall gegeben, dass  $|E_1 - E_2 \pm \hbar\omega_L|/\hbar \gg |\Omega_{21}^-| = |\Omega_{21}^+|$ . Analog zum Vorgehen in Abschnitt 1.4.4 kann man dann die Terme, die im Wechselwirkungsbild  $\propto \exp(\pm i(E_1 - E_2 \pm \hbar\omega_L)t/\hbar)$  sind, vernachlässigen. Physikalisch bedeutet dies, dass der Übergang zwischen den Zuständen  $|1\rangle$  und  $|2\rangle$  bei zu schwacher Kopplung  $|\hbar\Omega_{21}^-|$  gegenüber der Frequenz des treibenden Feldes stark verstimmt ist. Somit lautet  $\hat{H}_{A,\text{Feld}}$  nach Anwendung der RWA

$$\hat{H}_{A,\text{Feld}} = \frac{1}{2} \left( \left( e^{+i\omega_L t} \hbar\Omega_{23}^- + e^{-i\omega_L t} \hbar\Omega_{23}^+ \right) |2\rangle\langle 3| + \text{h.c.} \right). \quad (3.45)$$

Die RWA bewirkt somit, dass das klassische Feld nur den Übergang zwischen den Zuständen  $|2\rangle$  und  $|3\rangle$  treibt.

Aufgrund der Zeitabhängigkeit des elektrischen Feldes in Gleichung (3.40) bietet sich für die weitere Behandlung des getriebenen 3NS eine unitäre Transformation  $\hat{U}_{\omega_L}(t)$  in ein im atomaren Hilbertraum mit Frequenz  $\omega_L$  rotierendes Bezugssystem an:

$$\hat{U}_{\omega_L}(t) = e^{-i\omega_L(\zeta|3\rangle\langle 3|)t}, \quad (3.46)$$

mit einem vorzeichenbestimmenden Koeffizienten

$$\zeta = \begin{cases} +1, & \text{für } E_3 > E_2, \\ -1, & \text{für } E_3 < E_2. \end{cases} \quad (3.47)$$

Ein Zustand in dem rotierenden Bezugssystem  $|\Psi(\mathbf{r}, t)\rangle$  ergibt sich aus einem Zustand  $|\Psi(\mathbf{r}, t)\rangle_S$  im Schrödingerbild durch

$$|\Psi(\mathbf{r}, t)\rangle = \hat{U}_{\omega_L}^\dagger(t) |\Psi(\mathbf{r}, t)\rangle_S. \quad (3.48)$$

Der Hamiltonoperator  $\hat{H}_A$  des getriebenen Atoms im rotierenden Bezugssystem ergibt sich aus jenem im Schrödingerbild durch

$$\hat{H}_A = \hat{U}_{\omega_L}^\dagger(t) \left( \hat{H}_{A,\text{frei}} + \hat{H}_{A,\text{Feld}} \right) \hat{U}_{\omega_L}(t) - \hbar\omega_L\zeta|3\rangle\langle 3|. \quad (3.49)$$

Dies folgt durch Einsetzen von Gleichung (3.48) in die zeitabhängige Schrödingergleichung (1.31). Für den ersten Term in Gleichung (3.49) ergibt sich

$$\begin{aligned}\hat{U}_{\omega_L}^\dagger(t) \hat{H}_{A,\text{frei}} \hat{U}_{\omega_L}(t) &= E_1 |1\rangle\langle 1| + E_2 |2\rangle\langle 2| + E_3 e^{+i\zeta\omega_L t} |3\rangle\langle 3| e^{-i\zeta\omega_L t} \\ &= \sum_{l=1}^3 E_l |l\rangle\langle l| = \hat{H}_{A,\text{frei}}, \quad (3.50)\end{aligned}$$

<sup>8</sup>Vergleiche Abschnitt 1.4.4

Der zweite Term in Gleichung (3.49) ergibt

$$\hat{\mathcal{U}}_{\omega_L}^\dagger(t) \hat{H}_{A,\text{Feld}} \hat{\mathcal{U}}_{\omega_L}(t) = \frac{1}{2} \left( \left( \hbar \Omega_{23}^- e^{-i(\zeta-1)\omega_L t} + \hbar \Omega_{23}^+ e^{-i(\zeta+1)\omega_L t} \right) |2\rangle\langle 3| + \text{h.c.} \right), \quad (3.51)$$

Nun folgt aus Gleichung (3.47), dass in Gleichung (3.51) zwei der vier Exponenten verschwinden. Dies geschieht aufgrund von Gleichung (3.47) in Abhängigkeit davon, ob der Zustand  $|3\rangle$  energetisch höher oder niedriger liegt, als der Zustand  $|2\rangle$ . Die verbleibenden Exponentialfunktionen oszillieren dann mit  $2\omega_L$ . Ist der verbleibende Übergang nicht ultrastark an das elektrische Feld gekoppelt, das heißt  $2\omega_L \gg |\Omega_{23}^\pm|$ , so kann man auch diese schnell oszillierenden Terme im Rahmen der RWA vernachlässigen. Damit ergibt sich

$$\hat{H}_{A,\text{Feld}} = \frac{\hbar \Omega_R}{2} |2\rangle\langle 3| + \frac{\hbar \Omega_R^*}{2} |3\rangle\langle 2|, \quad (3.52)$$

mit der Rabifrequenz

$$\Omega_R = \begin{cases} \Omega_{23}^-, & \text{für } E_3 > E_2, \\ \Omega_{23}^+, & \text{für } E_2 > E_3. \end{cases} \quad (3.53)$$

Entsprechend der Ausführungen in Abschnitt 1.4.3 lässt sich ein transformierter Hamiltonoperator finden, dessen Rabifrequenz  $\Omega_R$  rein reell ist. Damit ergibt sich der Hamiltonoperator  $\hat{H}_A$  des stationär getriebenen 3NS im oszillierenden Bezugssystem zu

$$\hat{H}_A \stackrel{(3.49)}{\stackrel{(3.50)(3.52)}{=}} \sum_{l=1}^2 E_l |l\rangle\langle l| + (E_3 - \zeta \hbar \omega_L) |3\rangle\langle 3| + \frac{\hbar \Omega_R}{2} (|2\rangle\langle 3| + |3\rangle\langle 2|). \quad (3.54)$$

Dieser Hamiltonoperator lässt sich diagonalisieren:

$$\hat{H}_A = E_1 |1\rangle\langle 1| + E_- |- \rangle\langle -| + E_+ |+\rangle\langle +|, \quad (3.55)$$

mit den Eigenenergien

$$E_\pm = \frac{1}{2} \left( E_2 + E_3 - \zeta \hbar \omega_L \pm \sqrt{\hbar^2 \Omega_R^2 + (E_2 - E_3 + \zeta \hbar \omega_L)^2} \right), \quad (3.56)$$

und den Eigenzuständen

$$|\pm\rangle = \frac{\mathcal{B}_\pm |2\rangle + \hbar \Omega_R |3\rangle}{\sqrt{\hbar^2 \Omega_R^2 + \mathcal{B}_\pm^2}}, \quad (3.57)$$

mit

$$\mathcal{B}_\pm = E_2 - E_3 + \zeta \hbar \omega_L \pm \sqrt{\hbar^2 \Omega_R^2 + (E_2 + E_3 + \zeta \hbar \omega_L)^2}. \quad (3.58)$$

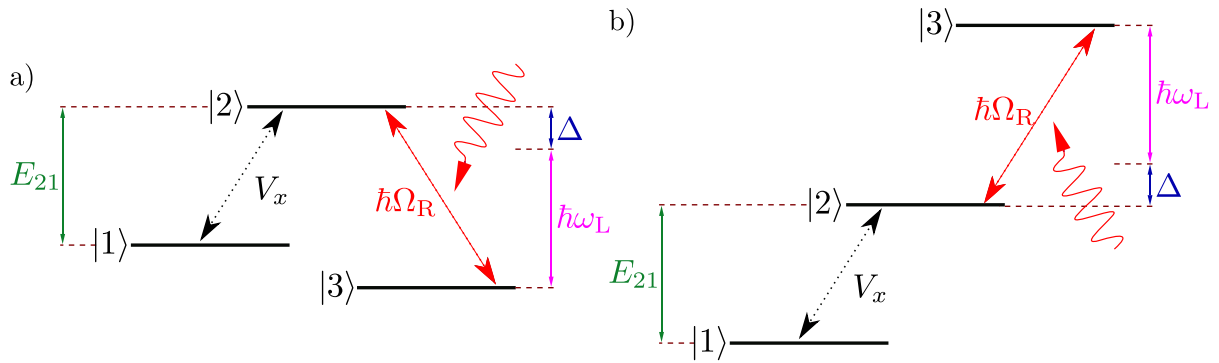


Abbildung 3.6: a) Ein getriebenes  $\Lambda$ - und b) ein zwischen seinen oberen Zuständen getriebenes  $\Xi$ -System. Die Übergänge zwischen den Zuständen  $|2\rangle$  und  $|3\rangle$  werden durch ein klassisches, zeitharmonisches, elektrisches Feld getrieben, das mit einer Stärke von  $\hbar\Omega_R$ , mit der Rabifrequenz  $\Omega_R$ , an den Übergang koppelt. Die Frequenz  $\omega_L$  des treibenden Feldes ist zur Übergangsenergie verstimmt um den Wert  $\Delta/\hbar$ . Die Photonen im Wellenleiter koppeln mit der Stärke  $V_x$  an den verbleibenden, ungetriebenen Übergang zwischen den Zuständen  $|1\rangle$  und  $|2\rangle$ , mit der Übergangsenergie  $E_{21}$ .

### 3.3.2 Wechselwirkung getriebener Dreiniveausysteme mit einzelnen Photonen

Im Folgenden nehme ich an, dass das in Abschnitt 3.3.1 beschriebene 3NS zusätzlich zum klassischen elektromagnetischen Feld aus Gleichung (3.40) auch noch mit einem weiteren, quantisierten elektromagnetischen Kontinuum wechselwirkt. Dabei sei es so, dass die Übergangsenergie des klassisch getriebenen Übergangs stark gegenüber der Energie der Kontinuumsphotonen verstimmt ist und gleichzeitig die Kopplung dieser Photonen an diesen Übergang nicht ultrastark sei. Bei der Modellierung der Wechselwirkung des quantisierten Kontinuums mit dem klassisch getriebenen Atom führt dann die Anwendung der RWA zu dem Ergebnis, dass die Photonen des Kontinuums nur an den ungetriebenen Übergang des Atoms zwischen den Zuständen  $|1\rangle$  und  $|2\rangle$  koppeln.

Der Fall  $E_1 < E_2$

Sei zunächst angenommen, dass  $E_1 < E_2$  gilt. Entsprechend den Abbildungen 3.6a) und b) trifft dies auf das getriebene  $\Lambda$ -System und das zwischen den beiden oberen Zuständen getriebene  $\Xi$ -System zu. Der Hamiltonoperator  $\hat{H}_{LM}$  der Atom-Photon-Wechselwirkung nimmt im Rahmen der RWA die Form des Hamiltonoperators der Wechselwirkung eines Zweiniveausystems aus Gleichung (1.64) an, mit  $|1\rangle$  als Grundzustand und  $|2\rangle$  als angeregten Zustand des 2NS und der Kopplungsstärke  $V_x$ :

$$\hat{H}_{LM} = \sum_{x=x_1}^{x_N} V_x \left( \hat{a}_x |2\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 2| \hat{a}_x^\dagger \right). \quad (3.59)$$

Mit

$$|2\rangle \stackrel{(3.57)}{=} \sqrt{\frac{\hbar^2 \Omega_R^2 + (E_2 - E_3 + \zeta \hbar \omega_L) \mathcal{B}_+}{2 \left( \hbar^2 \Omega_R^2 + (E_2 - E_3 + \zeta \hbar \omega_L)^2 \right)}} |+\rangle + \sqrt{\frac{\hbar^2 \Omega_R^2 + (E_2 - E_3 + \zeta \hbar \omega_L) \mathcal{B}_-}{2 \left( \hbar^2 \Omega_R^2 + (E_2 - E_3 + \zeta \hbar \omega_L)^2 \right)}} |-\rangle \quad (3.60)$$

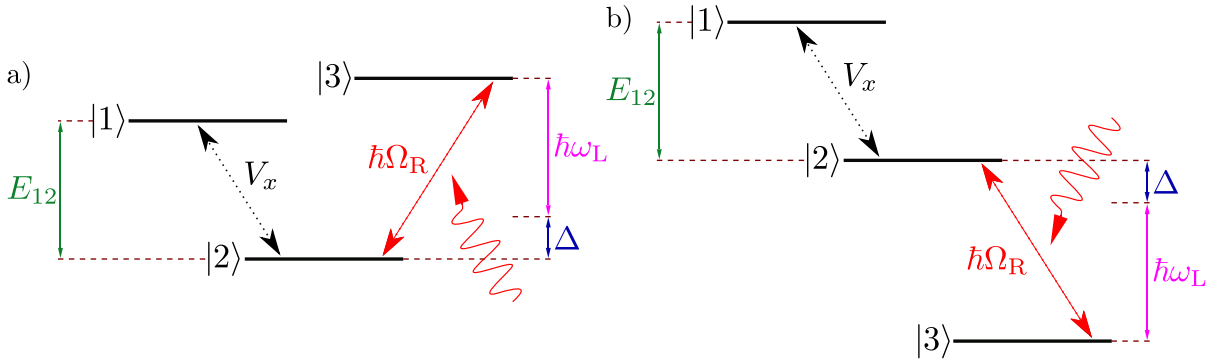


Abbildung 3.7: a) Ein getriebenes V- und b) ein zwischen seinen unteren Zuständen getriebenes  $\Xi$ -System. Die Übergänge zwischen den Zuständen  $|3\rangle$  und  $|2\rangle$  werden durch ein klassisches, zeitharmonisches, elektrisches Feld getrieben, das mit einer Stärke von  $\hbar\Omega_R$ , mit der Rabi-Frequenz  $\Omega_R$ , an den Übergang koppelt. Die Frequenz  $\omega_L$  des treibenden Feldes ist zur Übergangsenergie verstimmt um den Wert  $\Delta/\hbar$ . Die Photonen im Wellenleiter koppeln mit der Stärke  $V_x$  an den verbleibenden, ungetriebenen Übergang zwischen den Zuständen  $|2\rangle$  und  $|1\rangle$ , mit der Übergangsenergie  $E_{12}$ .

ergibt sich

$$\hat{H}_{LM} = \sum_{l=\pm} \sum_{x=x_1}^{x_N} V_l^x \left( \hat{a}_x |l\rangle \langle 1| + |1\rangle \langle l| \hat{a}_x^\dagger \right), \quad (3.61)$$

wobei

$$V_\pm^x = V_x \sqrt{\frac{\hbar^2 \Omega_R^2 + (E_2 - E_3 + \zeta \hbar \omega_L) \mathcal{B}_\pm}{2 (\hbar^2 \Omega_R^2 + (E_2 - E_3 + \zeta \hbar \omega_L)^2)}}. \quad (3.62)$$

Interessanterweise hat der Hamiltonoperator  $\hat{H}_{LM}$  aus Gleichung (3.61) die Form des Hamiltonoperators der Licht-Materie-Wechselwirkung eines ungetriebenen V-Systems aus Gleichung (1.73). Das getriebene  $\Lambda$ -System und das zwischen seinen beiden oberen Zuständen getriebene  $\Xi$ -System lassen sich also auf ungetriebene V-Systeme abbilden. Da die Physik des „oben“ getriebenen  $\Xi$ -Systems dementsprechend äquivalent zur Physik des getriebenen  $\Lambda$ -Systems ist, werde ich mich bei den folgenden Untersuchungen im Falle  $E_1 < E_2$  auf das getriebene  $\Lambda$ -System konzentrieren. Die Resultate lassen sich jedoch auf das entsprechende  $\Xi$ -System übertragen.

Mit den Bezeichnungen aus Abbildung 3.6a) lautet der Hamiltonoperator  $\hat{H}_A$  des „freien“ getriebenen  $\Lambda$ -Systems somit

$$\hat{H}_A = E_1 |1\rangle \langle 1| + E_- |-\rangle \langle -| + E_+ |+\rangle \langle +|, \quad (3.63)$$

mit den Eigenzuständen

$$|\pm\rangle = \frac{\pm 1}{\sqrt{2\hbar\Omega_{\text{Eff}}(\hbar\Omega_{\text{Eff}} \mp \Delta)}} \left( \hbar\Omega_R |2\rangle - (\Delta \mp \hbar\Omega_{\text{Eff}}) |3\rangle \right), \quad (3.64)$$

mit der effektiven Rabi-Frequenz

$$\Omega_{\text{Eff}} = \frac{\sqrt{\hbar^2 \Omega_R^2 + \Delta^2}}{\hbar}, \quad (3.65)$$

und mit den Energieeigenwerten

$$E_{\pm} = E_1 + E_{21} - \frac{1}{2} (\Delta \mp \hbar\Omega_{\text{Eff}}). \quad (3.66)$$

Der Hamiltonoperator  $\hat{H}_{\text{LM}}$  der Atom-Photon-Wechselwirkung entspricht dem aus Gleichung (3.61) mit den Kopplungsstärken

$$V_{\pm}^x = \frac{V_x \Omega_R}{\sqrt{2 \hbar\Omega_{\text{Eff}} (\hbar\Omega_{\text{Eff}} \mp \Delta)}}. \quad (3.67)$$

Der Fall  $E_1 > E_2$

Die Abbildungen 3.7a) und b) zeigen die Termschemata eines getriebenen V-Systems und eines zwischen seinen beiden unteren Zuständen getriebenes  $\Xi$ -System. Dies sind die beiden Konfigurationen für die  $E_1 > E_2$  gilt. Der Operator  $\hat{H}_{\text{LM}}$  nimmt im Rahmen der RWA in der Basis des ungetriebenen Atoms, wie im Falle des getriebenen  $\Lambda$ -Systems, die Form der Wechselwirkung eines 2NS an, diesmal mit  $|2\rangle$  als Grundzustand und  $|1\rangle$  als angeregten Zustand:

$$\hat{H}_{\text{LM}} = \sum_{x=x_1}^{x_N} V_x \left( \hat{a}_x |1\rangle\langle 2| + |2\rangle\langle 1| \hat{a}_x^\dagger \right), \quad (3.68)$$

mit der Kopplungsstärke  $V_x$ . Im Eigensystem des „freien“ getriebenen Atoms wird aus Gleichung (3.68)

$$\hat{H}_{\text{LM}} = \sum_{l=\pm} \sum_{x=x_1}^{x_N} V_l^x \left( \hat{a}_x |1\rangle\langle l| + |l\rangle\langle 1| \hat{a}_x^\dagger \right), \quad (3.69)$$

mit den neuen Kopplungskonstanten  $V_{\pm}^x$  aus Gleichung (3.62). Der Operator  $\hat{H}_{\text{LM}}$  in Gleichung (3.69) hat dieselbe Form, wie der Hamiltonoperator der Atom-Photon-Wechselwirkung eines ungetriebenen  $\Lambda$ -Systems aus Gleichung (1.70). Das getriebene V-System und das zwischen seinen unteren Zuständen getriebene  $\Xi$ -System lassen sich also auf ungetriebene  $\Lambda$ -Systeme abbilden. Wie im Falle des getriebenen  $\Lambda$ -Systems werde ich mich bei den Untersuchungen von getriebenen Systemen, für die  $E_1 > E_2$  gilt, auf das getriebene V-System konzentrieren. Die gewonnenen Resultate gelten jedoch auch für das „unten“ getriebene  $\Xi$ -System.

Es ergibt sich mit den Bezeichnungen aus Abbildung 3.7a) der Hamiltonoperator  $\hat{H}_A$  des „freien“ getriebenen V-Systems zu

$$\hat{H}_A = (E_2 + E_{12}) |1\rangle\langle 1| + E_- |-\rangle\langle -| + E_+ |+\rangle\langle +|, \quad (3.70)$$

mit den Eigenzuständen

$$|\pm\rangle = \frac{\pm 1}{\sqrt{2 \hbar\Omega_{\text{Eff}} (\hbar\Omega_{\text{Eff}} \pm \Delta)}} \left( \hbar\Omega_R |2\rangle + (\Delta \pm \hbar\Omega_{\text{Eff}}) |3\rangle \right), \quad (3.71)$$

und den Eigenenergien

$$E_{\pm} = E_2 + \frac{1}{2} (\Delta \pm \hbar\Omega_{\text{Eff}}). \quad (3.72)$$

Die Kopplungskonstanten  $V_{\pm}^x$  des Operators  $\hat{H}_{\text{LM}}$  aus Gleichung (3.69) sind in diesem Fall

$$V_{\pm}^x = \frac{V_x \Omega_R}{\sqrt{2 \hbar\Omega_{\text{Eff}} (\hbar\Omega_{\text{Eff}} \pm \Delta)}}. \quad (3.73)$$

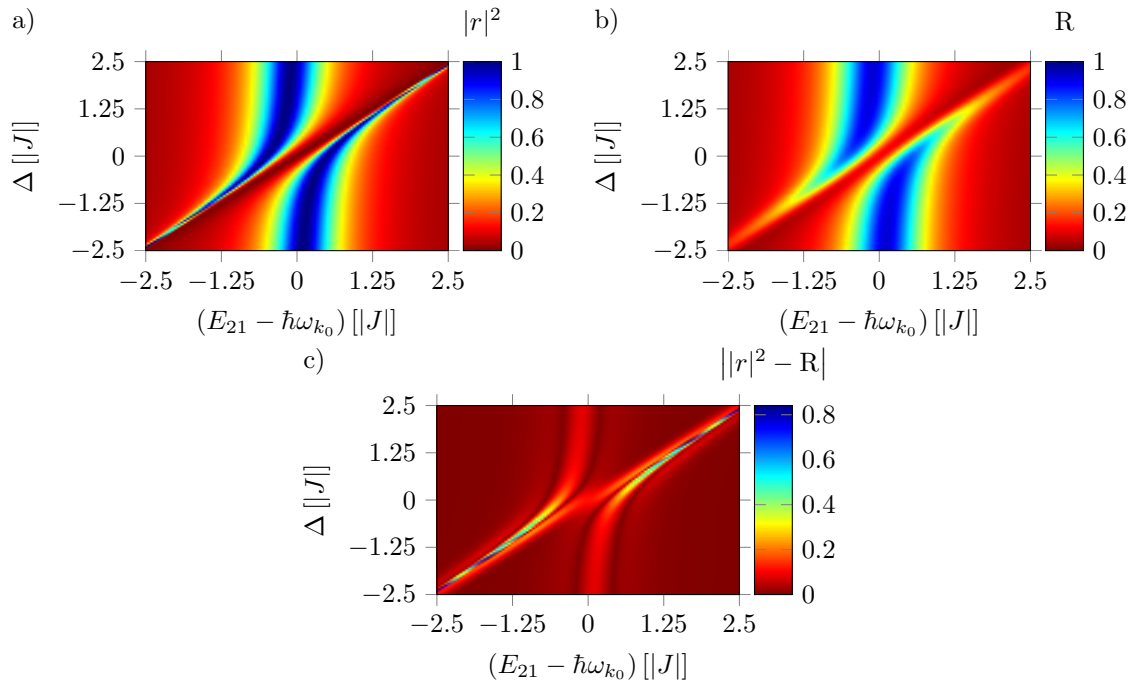


Abbildung 3.8: Analytische Transmittanzen a) für eine stationäre ebene Welle und b) für ein Gauß'sches Wellenpaket jeweils als Funktionen der Verstimmung des treibenden Feldes  $\Delta$  und der Verstimmung des Photons  $E_{21} - \hbar\omega_{k_0}$ . In c) ist die absolute Differenz dieser beiden Transmittanzen gezeigt. Die EIT im Falle der Zweiphotonenresonanz ist in den Hauptdiagonalen von a) und b) ersichtlich, dabei ist sie im Fall des Gauß'schen Wellenpakets aufgrund dessen spektraler Breite nicht voll ausgeprägt. Die Parameter der Simulationen sind  $J < 0$ ,  $V = \Omega_R = |J|$ ,  $E_{21} = \hbar\omega_{k_0}$ ,  $k_0 = \pi/(2\alpha)$ ,  $\omega_0 = 0$ ,  $s = 9\alpha$ ,  $x_z = 420\alpha$  und der Wellenleiter wurde durch  $N = 999$  Gitterpunkte modelliert.

### 3.3.3 Elektromagnetisch beeinflusstes Streuverhalten bei eingebettetem getriebenem $\Lambda$ -System

Für einen Wellenleiter mit einem eingebetteten getriebenen  $\Lambda$ -System, die zusammen durch die Gleichung (3.61) mit  $V_l^x = V_l \delta_{xx_\Lambda}$  und durch die Gleichungen (3.63) bis (3.67) beschrieben werden, lässt sich ähnlich wie in Abschnitt 3.2.3 ein Reflexionskoeffizient  $r$  berechnen:

$$r = \frac{-2iV^2(\Delta + \hbar\omega_k - E_{21})}{2iV^2(\Delta + \hbar\omega_k - E_{21}) - J \sin(k\alpha)(4(\hbar\omega_k - E_{21})(\Delta + \hbar\omega_k - E_{21}) - \Omega_R^2)}. \quad (3.74)$$

Wie in Referenz [78] für eine lineare Dispersionsrelation gezeigt, verschwindet der Reflexionskoeffizient aus Gleichung (3.74) im Falle einer Zweiphotonenresonanz, das heißt für  $\hbar\omega_k = E_{21} - \Delta$ . Dies ist, mit anderen Worten, eine EIT für ein einzelnes Photon und ein einzelnes Atom.

Das Besondere an einer EIT ist, dass selbst ein zum Streuer resonant gestimmtes Photon vollständig transmittiert wird. Normalerweise erwartet man in diesem Fall eine starke Wechselwirkung von Atom



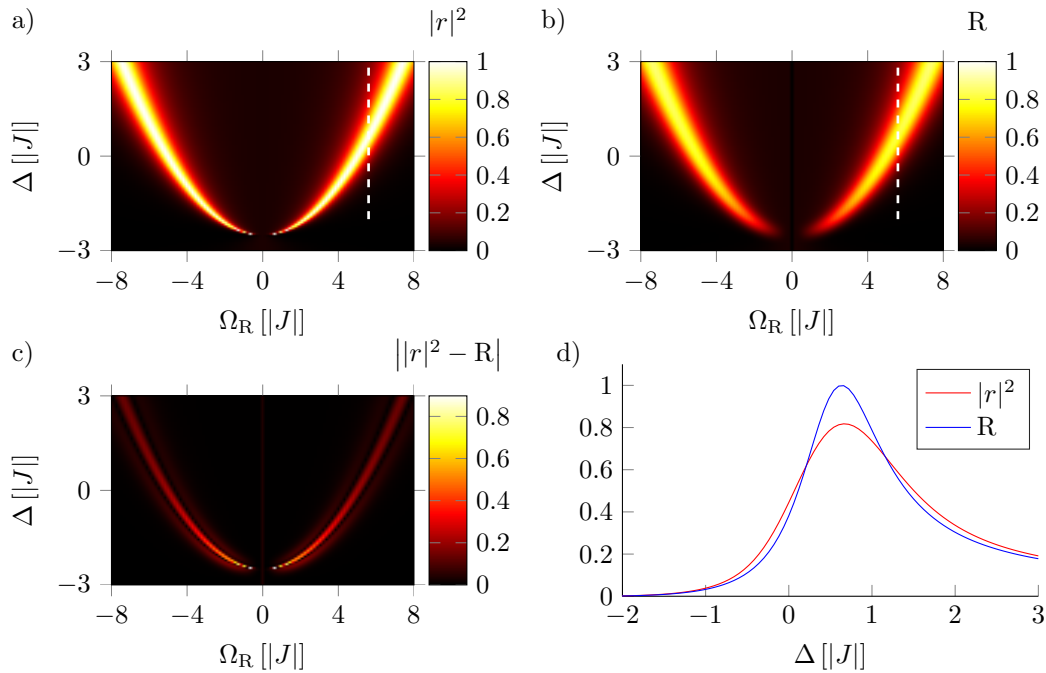


Abbildung 3.9: Analytische Reflektanzen a) für eine ebene Welle und b) für ein Gauß'sches Wellenpaket jeweils als Funktionen der Verstimmung  $\Delta$  und der Rabi-Frequenz  $\Omega_R$  des treibenden Feldes. In c) ist die absolute Differenz dieser beiden Reflektanzen gezeigt und d) zeigt den Ausschnitt beider Reflektanzen entlang der weißen, gestrichelten Linien in a) und b). Die Elektromagnetisch induzierte Wechselwirkung (EIW) ist auf den parabelförmigen, hellen Ästen in a) und b) zu erkennen, dabei ist sie im Fall des Gauß'schen Wellenpakets aufgrund dessen spektraler Breite nicht voll ausgeprägt. Die Parameter der Simulationen sind  $J < 0$ ,  $V = |J|$ ,  $E_{21} - \hbar\omega_{k_0} = 5/2|J|$ ,  $k_0 = \pi/(2\alpha)$ ,  $\omega_0 = 0$ ,  $s = 9\alpha$ ,  $x_z = 420\alpha$  und der Wellenleiter wurde durch  $N = 999$  Gitterpunkte modelliert.

und Photon bis hin zur vollständigen Reflexion, wie ich sie in Abschnitt 3.2.3 beschrieben habe. Durch das treibende Feld wird im Falle einer EIT die Wechselwirkung des Photons mit dem Atom jedoch vollständig unterdrückt.

In Abbildung 3.8 zeige ich die analytisch berechnete Reflektanz  $|r|^2$  und den Vergleich mit einer numerisch berechneten Reflektanz  $R$  nach Gleichung (3.6b) für ein Gauß'sches Einzelphotonwellenpaket. Der Effekt der EIT ist für den Fall des Wellenpakets nicht so stark ausgeprägt wie im Fall der stationären ebenen Welle. Dies ist eine Folge der endlichen spektralen Breite des Gauß'schen Wellenpakets.

Das Prinzip der EIT lässt sich jedoch auch umkehren: Üblicherweise gibt es kaum eine messbare Wechselwirkung zwischen einem Atom und einem dazu energetisch stark verstimmtten Photon. Mit Hilfe eines geeignet gewählten treibenden Feldes lässt sich bewirken, dass ein stark verstimmttes Photon mit einem  $\Lambda$ -System messbar, bis hin zur vollständigen Reflexion, wechselwirkt. Setzt man in Gleichung (3.74)  $r = -1$ , was einer vollständigen Reflexion mit einem Phasensprung von  $\pi$  entspricht, so

### 3 Einzelphotontransport in eindimensionalen Wellenleitern mit eingebetteten Dreiniveausystemen

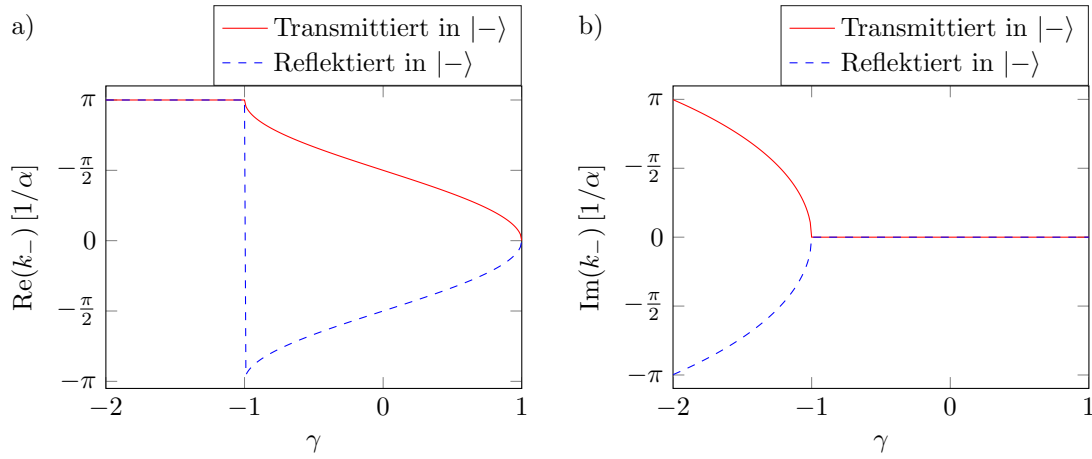


Abbildung 3.10: a) Realteil und b) Imaginärteil der Kreiswellenzahl  $k_-$  als Funktion des Parameters  $\gamma$  aus Gleichung (3.78). Die roten Linien entsprechen rechtslaufenden, also transmittierten Wellen und die blauen Linien entsprechen linkslaufenden, also reflektierten Wellen.

folgt hieraus die Bedingung für diese *elektromagnetisch induzierte Wechselwirkung* (EIW):

$$E_{21} - \hbar\omega_k = \frac{1}{2} (\Delta \pm \Omega_{\text{Eff}}). \quad (3.75)$$

Die Abbildung 3.9 zeigt die Reflektanz  $|r|^2$ , berechnet aus Gleichung (3.74), über  $\Delta$  und  $\Omega_R$ , sowie den Vergleich mit einer numerisch berechneten Reflektanz  $R$  für ein Gauß'sches Einzelphotonwellenpaket analog zum vorherigen Vorgehen bei der EIT. Die atomare Übergangsenergie  $E_{21}$  wurde zu  $E_{21} = \hbar\omega_0 - 2.5|J|$  gewählt und liegt somit außerhalb des cosinusförmigen photonischen Bandes des Wellenleiters mit NNWW. Trotzdem wird für das monochromatische Photon mit Energie  $\omega_0$  bei Erfüllung der Bedingung aus Gleichung (3.75) vollständige Reflexion erreicht. Für das Wellenpaket erreicht die Reflektanz laut den Abbildungen 3.9b) bis c) einen Wert von  $R \approx 0.8$ , was erneut mit der endlichen spektralen Breite des Wellenpakets erklärbar ist.

#### 3.3.4 Impulstransfer bei eingebettetem getriebenen V-System

Ein Wellenleiter mit einem eingebetteten, getriebenen V-System lässt sich durch die Gleichung (3.69) mit  $V_l^x = V_l \delta_{xx_A}$  und durch die Gleichungen (3.70) bis (3.73) beschreiben. Da sich ein getriebenes V-System effektiv wie ein ungetriebenes  $\Lambda$ -System verhält, sind für das getriebene V-System auch die selben Anfangsbedingungen, wie im Fall des ungetriebenen  $\Lambda$ -Systems realisierbar. Im Folgenden beschränke ich mich jedoch auf die Untersuchung des IKF des getriebenen V-Systems, bei dem das Atom anfangs, ohne Beschränkung der Allgemeinheit, im Zustand  $|+\rangle$  vorliegt.

Entsprechend der Gleichung (3.72) lauten die beiden Übergangsenergien  $E_{\pm 1}$  des effektiven  $\Lambda$ -Systems

$$E_{\pm 1} = E_1 - E_{\pm} \stackrel{(3.72)}{=} E_{12} - \frac{1}{2} (\Delta \pm \Omega_{\text{Eff}}). \quad (3.76)$$

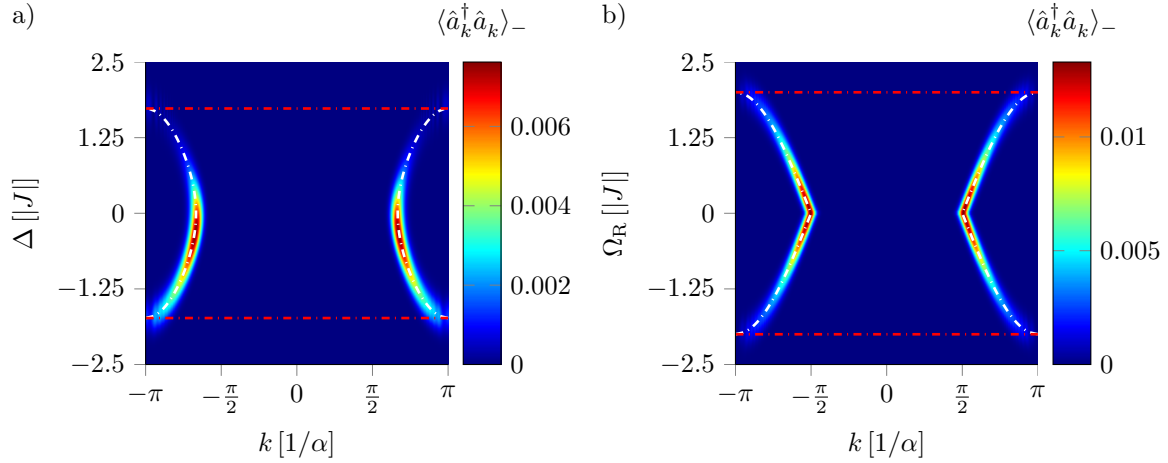


Abbildung 3.11: Impulsraumbesetzung des Kanals – in Abhängigkeit a) von der Verstimmung  $\Delta$  und b) von der Rabifrequenz  $\Omega_R$  am Ende der Simulation der Streuung eines Einzelphotonwellenpakets. Die gestrichelten weißen Linien folgen den nach Gleichung (3.78) für die Kreiswellenzahlen in diesem Kanal berechneten Werten. Die roten gestrichelten Linien begrenzen die Bandbreite des Wellenleiters. Die Parameter der Simulationen sind  $J < 0$ ,  $E_{12} = \hbar\omega_{k_0}$ ,  $\omega_0 = 0$ ,  $k_0 = \pi/(2\alpha)$ ,  $s = 9\alpha$ ,  $x_z = 420\alpha$  und a)  $\Omega_R = V = |J|$  beziehungsweise b)  $\Delta = 0$ . Der Wellenleiter ist in beiden Fällen durch  $N = 999$  Gitterpunkte modelliert.

Sei  $k_+$  die Kreiswellenzahl eines Photons, das im Kanal des Zustands  $|+\rangle$  absorbiert wird. Dann ist die Kreiswellenzahl  $k_-$  des korrespondierenden, in den Kanal des Zustands  $|-\rangle$  emittierten Photons aufgrund der Energieerhaltung festgelegt durch

$$\hbar\omega_{k_-} = \hbar\omega_{k_+} + E_{-1} - E_{+1}. \quad (3.77)$$

Aus den Gleichungen (3.76) und (3.77) folgt schließlich

$$k_- = -i \ln \left( \gamma \pm \sqrt{\gamma^2 - 1} \right), \quad (3.78)$$

mit

$$\gamma = \cos(k_+) + \frac{\Omega_{\text{Eff}}}{2J}. \quad (3.79)$$

Das variable Vorzeichen in Gleichung (3.78) legt fest, ob  $k_-$  zu einer transmittierten (+) oder reflektierten (−) Welle gehört. In den Abbildungen 3.10a) und b) ist die Abhängigkeit der Kreiswellenzahl  $k_-$  von  $\gamma$  gezeigt. Ist  $\gamma \leq -1$ , so ist  $k_-$  komplex mit einem konstanten Realteil  $\text{Re}(k_-) = \pi$ . In diesem Fall kann die Strahlung, die in den Kanal „−“ emittiert ist, in diesem nicht propagieren und wird vom Atom reabsorbiert und letztendlich zurück in den Kanal „+“ emittiert. Das Atom verbleibt somit im Zustand  $|+\rangle$  nach der Streuung. Dieser Effekt kann extrem verstärkt werden, indem die effektive Rabifrequenz  $\Omega_{\text{Eff}}$  auf einen Wert  $\Omega_{\text{Eff}} \geq 4|J|$  eingestellt wird. In diesem Fall verbleibt das Atom nach der Streuung im Zustand  $|+\rangle$  unabhängig von der Kreiswellenzahl  $k_+$  des gestreuten Photons. Für diesen Effekt sind

die Bandkanten<sup>9</sup>. In Wellenleitersystemen mit unbeschränkten Dispersionsrelationen kann dies nicht auftreten. In den Abbildungen 3.11a) und b) ist die Impulsverteilung  $\langle \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k \rangle_-$  des Photons im Kanal „–“ jeweils als Funktion der Verstimmung  $\Delta$  des treibenden Feldes beziehungsweise der Rabifrequenz  $\Omega_R$  gezeigt. Der Bereich, in dem die Emission in den Kanal „–“ aufgrund der beschränkten Bandbreite der Dispersionsrelation des Wellenleiters verboten ist, ist hier deutlich erkennbar.

## 3.4 Zusammenfassung

In diesem Kapitel habe ich die Eigenschaften des Transports einzelner Photonen in einem 1D Wellenleiter mit einem eingebetteten 3NS untersucht. In einem solchen System mit eingebettetem, ungetriebenen V-System ist bei der Einzelphotonwellenpaketstreuung für kleine, jedoch endliche Verstimmungen  $\delta$  der atomaren Übergangsenergien die Reemissionszeit des Atoms in den Wellenleiter erhöht. Ich habe gezeigt, dass dies durch die Anregung von NDZ bedingt wird. Ich habe außerdem demonstriert, dass dieser Effekt auch bei einem vereinfachten Modell, in dem der Wellenleiter durch eine verlustbehaftete Kavität ersetzt wurde, auftritt. Daher sollte dieser Effekt unabhängig von der Art des Wellenleiters, in den das V-Atom eingebettet ist, auftreten.

Im Gegensatz zum V-Atom können im Fall eines in einen Wellenleiter eingebetteten  $\Lambda$ -Systems nichtstationäre dunkle Zustände auftreten. Außerdem hängen im 2KF bei einem entarteten  $\Lambda$ -System die Streucharakteristiken stark von der relativen Phase zwischen den unteren atomaren Zuständen vor der Streuung ab.

Ist in den Wellenleiter ein getriebenes  $\Lambda$ -System eingebettet, können bei entsprechender Wahl der Parameter des treibenden Feldes sowohl eine EIT, als auch eine EIW auftreten. Beide Effekte können jedoch nicht mit maximaler Effizienz für Einzelphotonwellenpakete verwirklicht werden, da diese eine endliche spektrale Breite aufweisen. Ich habe außerdem gezeigt, wie die endliche Bandbreite der Dispersionsrelation eines Wellenleiters mit NNWW die Streueigenschaften eines getriebenen V-Systems beeinflusst und wie die Variation der Parameter des treibenden Feldes die Zustände von Atom und Photon nach der Streuung beeinflussen.

---

<sup>9</sup>Vergleiche Abschnitt 1.5.4.

# 4 DIE SCHMIDT-ZERLEGUNG UND VERSCHRÄNKUNG IM KONTEXT DER WELLENLEITERQUANTENELEKTRODYNAMIK

*Im vorliegenden Kapitel diskutiere ich die Anwendung der Schmidt-Zerlegung auf Zustände von WQED Systemen, für die sich ein Anregungszahloperator definieren lässt. Ich leite allgemeine Ausdrücke für die Schmidt-Zahl und für die von Neumann Entropie in solchen Systemen her. Die Schmidt-Zahl und die von Neumann Entropie sind zwei Maße für Verschränkung in quantenmechanischen Zuständen.*

*Ich untersuche weiterhin die Erzeugung von Verschränkung zwischen einem  $\Lambda$ -System, das in einem Wellenleiter mit  $NNWW$  eingebettet ist, und einem Einzelphotonwellenpaket, das in dem Wellenleiter an dem Atom gestreut wird. Dabei untersuche ich den Einfluss der Form und Breite der Einhüllenden des Wellenpakets, sowie der energetischen Verstimmung der atomaren Übergänge zueinander. Es zeigt sich, dass hierbei hauptsächlich die Breite des Wellenpakets im  $k$ -Raum und die Emissionszeiten der atomaren Übergänge den Grad der Verschränkung bestimmen.*

## 4.1 Einführung

Sind zwei Systeme A und B im Sinne der Quantenmechanik bezüglich einer bestimmten Eigenschaft W in einem gemeinsamen Quantenzustand  $|AB\rangle$  *verschränkt*, so bedeutet dies physikalisch, dass die Ergebnisse von Messprozessen der Eigenschaft W jeweils an den beiden Systemen A und B maximal korreliert sind. Diese Korrelationen sind unabhängig davon vorhanden, ob in dem Zustand  $|AB\rangle$  die Messergebnisse vor der Messung scharf festgelegt sind, oder ob die Messung einen Kollaps des Zustandes  $|AB\rangle$  in das Eigensystem des mit der Messung assoziierten hermiteschen Operators verursacht. Mathematisch sind zwei quantenmechanische Systeme A und B miteinander verschränkt, wenn sich ihr gemeinsamer Zustand  $|AB\rangle$  nicht als Produktzustand  $|AB\rangle = |A\rangle \otimes |B\rangle$  schreiben lässt.

Verschränkte Zustände bilden die Basis nahezu aller Algorithmen und Verfahren der Quanteninformationsverarbeitung und sind somit für Quantencomputing [84], Quantenkryptographie [85] und Quantensimulation [86] von großer Bedeutung. Dabei wird dem Photon als „fliegendes“ Quantensystem häufig die Kandidatenrolle des Transmitters von Quanteninformationen zwischen verschiedenen Knoten in quanteninformationsverarbeitenden Netzwerken zugesprochen [7].

Bevor man jedoch ein solches „Quanteninternet“, also ein quanteninformationsverarbeitendes Netzwerk, verwirklichen kann, müssen die grundlegenden Vorgänge der Licht-Materie-Wechselwirkung auch im Hinblick von Verschränkung in solchen Netzwerken bekannt und verstanden sein. Hierzu bieten sich Modelle der WQED an, durch die der Transport von Photonen in Wellenleitern und deren Wechselwirkung mit einzelnen Atomen beschrieben wird. In einem „Quanteninternet“, bei dem das Photon die Rolle des Informationsüberträgers zwischen Netzwerkknoten übernimmt, muss das Licht von einem Startknoten zu einem Zielknoten möglichst verlustfrei geführt werden, wozu sich Wellenleiter anbieten. Außerdem müssen die Informationen an den Orten der Start- und Zielknoten an das beziehungsweise von dem Photon übertragen werden, was Emissions- und Absorptionsprozessen entspricht, also Vorgänge der Licht-Materie-Wechselwirkung einzelner Photonen mit einzelnen Atomen.

Im Rahmen der WQED wurden Verschränkungseffekte zwischen zwei 2NS [87–90] oder innerhalb der räumlichen Photonverteilung [91] untersucht. Im Gegensatz dazu präsentiere ich in diesem Kapitel die Theorie zur Beschreibung von Verschränkung im Kontext der WQED zwischen dem Lichtfeld im Wellenleiter und einzelnen, in den Wellenleiter eingebetteten Emittlern. Dazu ist das Kapitel folgendermaßen strukturiert: In Abschnitt 4.2 präsentiere ich die grundlegende Theorie zur Quantifizierung von Verschränkung im Rahmen der WQED. Hierzu erläutere ich in Abschnitt 4.2.1 den Formalismus der *Schmidt-Zerlegung*, die den Zugang zu quantitativen Verschränkungsmaßen für zweikomponentige Quantensysteme bietet. Diesen Formalismus wende ich in Abschnitt 4.2.2 auf Quantensysteme, bestehend aus einem Wellenleiter mit eingebettetem Mehrniveaumatom, an.

Des Weiteren untersuche ich in Abschnitt 4.3 die Erzeugung von Verschränkung zwischen einem in einen Wellenleiter mit NNWW eingebetteten  $\Lambda$ -System und einem Photon im Wellenleiter durch Streuung des Photons an dem Atom. Dazu präsentiere ich in Abschnitt 4.3.1 das untersuchte Modellsystem und gebe in Abschnitt 4.3.2 die stationäre Streulösung für das System an. Mit Hilfe dieser Streulösung konfiguriere ich die Systemparameter, um eine maximale Verschränkung durch die Einzelphotonstreuung an dem  $\Lambda$ -Atom zu erzielen. Inwieweit sich dies bei der Streuung verschieden geformter Einzelphotonwellenpakete am  $\Lambda$ -System realisieren lässt und welche weiteren Systemparameter zum Erreichen der maximalen Verschränkung relevant sind, kläre ich in Abschnitt 4.3.3. Zum Abschluss fasse ich die in diesem Kapitel gewonnenen Ergebnisse in Abschnitt 4.4 noch einmal zusammen.

## 4.2 Die Schmidt-Zerlegung und Verschränkung

### 4.2.1 Grundlagen

In diesem Abschnitt präsentiere ich die grundlegenden Konzepte der Schmidt-Zerlegung. Dabei orientiere ich mich teilweise an Referenz [24]. Gegeben seien ein reiner Zustand  $|\Psi\rangle$  und ein Dichteoperator  $\hat{\rho}$  eines aus zwei Subsystemen A und B zusammengesetzten Quantensystems. Die Hilbertraumdimension des Systems A sei  $N_A$ , die von System B sei  $N_B$ . Es gelte, ohne Beschränkung der Allgemeinheit,  $N_A \leq N_B$ . Sowohl der Zustand  $|\Psi\rangle$ , als auch der Dichteoperator  $\hat{\rho}$  können in beliebige, vollständige orthonormale Basen  $\{|a_i\rangle\}$  mit  $i \in \{1, 2, \dots, N_A\}$  beziehungsweise  $\{|b_j\rangle\}$  mit  $j \in \{1, 2, \dots, N_B\}$  der

Hilberträume der Subsysteme A und B ausgedrückt werden

$$|\Psi\rangle = \sum_{i=1}^{N_A} \sum_{j=1}^{N_B} c_{ij} |a_i\rangle \otimes |b_j\rangle, \quad (4.1a)$$

$$\hat{\rho} = |\Psi\rangle\langle\Psi| = \sum_{i,k=1}^{N_A} \sum_{j,l=1}^{N_B} c_{ij} c_{kl}^* |a_i\rangle\langle a_k| \otimes |b_j\rangle\langle b_l|. \quad (4.1b)$$

Die reduzierten Dichteoperatoren  $\hat{\rho}_A$  und  $\hat{\rho}_B$  der beiden Subsysteme erhält man durch die Bildung der Spur bezüglich des komplementären Subsystems

$$\hat{\rho}_A = \sum_{j=1}^{N_B} \langle b_j | \hat{\rho} | b_j \rangle = \sum_{i,k=1}^{N_A} \sum_{j=1}^{N_B} c_{ij} c_{kj}^* |a_i\rangle\langle a_k|, \quad (4.2a)$$

$$\hat{\rho}_B = \sum_{i=1}^{N_A} \langle a_i | \hat{\rho} | a_i \rangle = \sum_{l,j=1}^{N_B} \sum_{i=1}^{N_A} c_{ij} c_{il}^* |b_j\rangle\langle b_l|. \quad (4.2b)$$

Das grundlegende Theorem, welches die Schmidt-Zerlegung beschreibt, lautet folgendermaßen:

*Jeder reine Zustand  $|\Psi\rangle$  eines aus zwei Subsystemen A und B mit den oben genannten Eigenschaften zusammengesetzte Quantensystems lässt sich schreiben als*

$$|\Psi\rangle = \sum_{i=1}^{N_A} g_i |u_i\rangle \otimes |v_i\rangle, \quad (4.3)$$

mit den  $N_A$ -dimensionalen, orthonormalen Basen  $\{|u_i\rangle\}$  des Hilbertraumes des Systems A und  $\{|v_i\rangle\}$  aus dem Hilbertraum des Systems B, mit jeweils  $i \in \{1, 2, \dots, N_A\}$  und mit  $\sum_{i=1}^{N_A} |g_i|^2 = 1$ . Gleichung (4.3) beschreibt die Schmidt-Zerlegung des Zustandes  $|\Psi\rangle$ .

Der Dichteoperator  $\hat{\rho}$  zum Zustand  $|\Psi\rangle$  lautet in der Schmidt-Zerlegung

$$\hat{\rho} = \sum_{i,k=1}^{N_A} g_i g_k^* |u_i\rangle\langle u_k| \otimes |v_i\rangle\langle v_k|. \quad (4.4)$$

Die  $g_i$  sind die sogenannten *Schmidt-Koeffizienten*. Der Beweis zur Schmidt-Zerlegung führt sich folgendermaßen: Sei  $\{|u_i\rangle\}$  die Eigenbasis von  $\hat{\rho}_A$  aus Gleichung (4.2a). Sei  $\{|v'_i\rangle\}$  eine beliebige Basis des Hilbertraumes des Systems B. Dann kann  $\hat{\rho}$  aus Gleichung (4.1b) geschrieben werden als

$$\hat{\rho} = \sum_{i,k=1}^{N_A} \sum_{j,l=1}^{N_B} h_{ij} h_{kl}^* |u_i\rangle\langle u_k| \otimes |v'_j\rangle\langle v'_l|. \quad (4.5)$$

Da ich  $\hat{\rho}_A$  in der Basis  $\{|u_i\rangle\}$  als diagonal vorausgesetzt habe, muss gelten dass

$$\sum_{j=1}^{N_B} h_{ij} h_{kj}^* = |f_i|^2 \delta_{ik}, \quad (4.6)$$

#### 4 Die Schmidt-Zerlegung und Verschränkung im Kontext der Wellenleiterquantenelektrodynamik

Diese Bedingung lässt einen Wechsel in eine andere orthogonale Basis aus dem Hilbertraum des Systems B zu: Ich definiere mir für jedes  $|f_i| \neq 0$  und für jeden Zustand  $|u_i\rangle$  einen neuen Zustand

$$|w_i\rangle = \sum_{j=1}^{N_B} \frac{h_{ij}}{f_i} |v'_j\rangle, \quad \text{mit } i \in \{1, 2, \dots, N_A\}. \quad (4.7)$$

Damit wird der Dichteoperator  $\hat{\rho}$  aus Gleichung (4.5) zu

$$\hat{\rho} = \sum_{i,k=1}^{N_A} \sum_{j,l=1}^{N_B} f_i f_k^* |u_i\rangle \langle u_k| \otimes \frac{h_{ij}}{f_i} |v'_j\rangle \langle v'_l| \frac{h_{kl}^*}{f_k^*} \stackrel{(4.7)}{=} \sum_{i,k=1}^{N_A} f_i f_k^* |u_i\rangle \langle u_k| \otimes |w_i\rangle \langle w_k|. \quad (4.8)$$

Die ganz rechte Seite hat die gesuchte Form aus Gleichung (4.4), mit  $\{|v_i\rangle\} = \{|w_i\rangle\}$  und mit den Koeffizienten  $\{g_i\} = \{f_i\}$ . *Quod erat demonstrandum (Q.E.D.)!*

Die Basen  $\{|u_i\rangle\}$  und  $\{|v_i\rangle\}$  werden zusammen als *Schmidt-Basis* bezeichnet. Die Schmidt-Zerlegung selbst ist nicht eindeutig und kann nicht ohne Weiteres auf Systeme, die aus mehr als zwei Komponenten bestehen, erweitert werden. Aus Gleichung (4.4) folgt für die reduzierten Dichteoperatoren  $\hat{\rho}_A$  und  $\hat{\rho}_B$  in der Schmidt-Basis

$$\hat{\rho}_A = \sum_{i=1}^{N_A} |g_i|^2 |u_i\rangle \langle u_i|, \quad (4.9a)$$

$$\hat{\rho}_B = \sum_{i=1}^{N_A} |g_i|^2 |v_i\rangle \langle v_i|. \quad (4.9b)$$

Die Dichteoperatoren  $\hat{\rho}_A$  und  $\hat{\rho}_B$  sind somit in der Schmidt-Basis beide diagonal und weisen außerdem das gleiche Spektrum  $\sigma(\hat{\rho}_A) = \sigma(\hat{\rho}_B) = \{|g_i|^2\}$  auf.

Mit Hilfe der Schmidt-Zerlegung lassen sich Maße für Verschränkung in einem aus zwei Subkomponenten zusammengesetzten System in einem reinen Zustand definieren. Wenn in Gleichung (4.3) exakt ein  $g_i \neq 0$  ist, befindet sich das System in einem Produktzustand. Im Gegensatz dazu sind die beiden Systeme maximal verschränkt, wenn

$$\forall i : |g_i|^2 = \frac{1}{N_A}, \quad (4.10)$$

gilt. Um nun den Grad der Verschränkung beider Systeme explizit zu quantifizieren, bieten sich die *Schmidt-Zahl* [92]

$$K = \frac{1}{\sum_{i=1}^{N_A} |g_i|^4}, \quad (4.11)$$

oder die *von Neumann Entropie* [24]

$$S = - \sum_{i=1}^{N_A} |g_i|^2 \log_2(|g_i|^2), \quad (4.12)$$

an. Hierbei gilt es  $\hat{\rho}_A$  aus Gleichung (4.2a) zur Bestimmung der  $|g_i|^2$  zu diagonalisieren. Die Subsysteme sind dann maximal verschränkt, wenn  $K = N_A$  beziehungsweise  $S = \log_2(N_A)$  ergeben. Andererseits liegt ein Produktzustand der beiden Systeme vor, wenn  $K = 1$  beziehungsweise  $S = 0$  gelten.



### 4.2.2 Die Schmidt-Zerlegung im Fall von Wellenleitern mit eingebetteten Mehrniveausystemen

Im Folgenden betrachte ich ein System aus einem Wellenleiter mit eingebetteter Quantenstörstelle, zu dem ein Anregungszahloperator  $\hat{C}$  entsprechend Gleichung (2.31) definiert werden kann. Die Hamiltonoperatoren des Wellenleiters  $\hat{H}_{EM}$ , des Atoms  $\hat{H}_A$  und der Licht-Materie-Wechselwirkung  $\hat{H}_{LM}$ , die ein solches System beschreiben, sind durch die Gleichungen (2.33), (2.34) und (2.35) gegeben. Einen Zustand  $|\Psi\rangle_Q$  dieses Systems, der  $Q$  Anregungen enthält, ist in Gleichung (2.36) definiert. Diesen Zustand gebe ich hier erneut in leicht abgewandelter Form wieder:

$$\begin{aligned}
 |\Psi\rangle_Q &= \sum_{\substack{x'=x_1, x^{2'}=x, \dots \\ \dots, x^{Q'}=x^{(Q-1)'}}}^{x_N} \sum_{\{p\}_0} \Phi_p^{x' \dots x^{Q'}} \mathcal{N}_{x', \dots, x^{Q'}} \hat{a}_{x'}^\dagger \dots \hat{a}_{x^{Q'}}^\dagger |\mathbf{0}, p\rangle \\
 &+ \sum_{\substack{x'=x_1, x^{2'}=x, \dots \\ \dots, x^{(Q-1)'}=x^{(Q-2)'}}}^{x_N} \sum_{\{r\}_1} \Phi_r^{x' \dots x^{(Q-1)'}} \mathcal{N}_{x', \dots, x^{(Q-1)'}} \hat{a}_{x'}^\dagger \dots \hat{a}_{x^{(Q-1)'}}^\dagger |\mathbf{0}, r\rangle \\
 &+ \dots \\
 &+ \sum_{x'=x_1}^{x_N} \sum_{\{s\}_{Q-1}} \Phi_s^{x'} \hat{a}_{x'}^\dagger |\mathbf{0}, s\rangle + \sum_{\{u\}_Q} \Phi_u |\mathbf{0}, u\rangle.
 \end{aligned} \tag{4.13}$$

In dieser Gleichung normieren die Faktoren  $\mathcal{N}_{x', \dots, x^{Q'}}$  die Zustände  $\hat{a}_{x'}^\dagger \dots \hat{a}_{x^{Q'}}^\dagger |\mathbf{0}\rangle$ . Der Zustand aus Gleichung (4.13) hat die Form des Zustands aus Gleichung (4.1a), mit

$$c_{ij} \in \left\{ \{\Phi_p^{x' \dots x^{Q'}}\}, \{\Phi_r^{x' \dots x^{(Q-1)'}}\}, \dots, \{\Phi_s^{x'}\}, \{\Phi_u\} \right\}, \tag{4.14a}$$

$$|a_j\rangle \in \left\{ \{p\}_0, \{r\}_1, \dots, \{s\}_{Q-1}, \{u\}_Q \right\}, \tag{4.14b}$$

$$|b_i\rangle \in \left\{ \{\mathcal{N}_{x', \dots, x^{Q'}} \hat{a}_{x'}^\dagger \dots \hat{a}_{x^{Q'}}^\dagger |\mathbf{0}\rangle\}, \{\mathcal{N}_{x', \dots, x^{(Q-1)'}} \hat{a}_{x'}^\dagger \dots \hat{a}_{x^{(Q-1)'}}^\dagger |\mathbf{0}\rangle\}, \dots, \{\hat{a}_{x'}^\dagger |\mathbf{0}\rangle\}, |\mathbf{0}\rangle \right\}. \tag{4.14c}$$

Im Folgenden nehme ich an, dass der Hilbertraum des Atoms gleich groß oder kleiner als der Hilbertraum des Wellenleiters im Unterraum mit  $Q$  Anregungen ist. In WQED Modellen werden die Atome üblicherweise mit wenigen Energieniveaus modelliert [58–68, 78–82, 93, 94], während 1D Wellenleiter durch einige hundert Gitterpunkte [58, 62, 66, 67, 81, 82, 93] oder als kontinuierlich [59–61, 63–65, 68, 78–80, 94] modelliert werden. Daher ist die Annahme bezüglich der Dimensionen der Hilberträume gerechtfertigt.

Wie in Abschnitt 4.2.1 gezeigt, entsprechen die Eigenwerte des reduzierten Dichteoperators des dimensional kleineren Subsystems, hier also des Atoms, den Betragsquadraten der Schmidt-Koeffizienten. Der aus dem Zustand  $|\Psi\rangle_Q$  aus Gleichung (4.13) berechnete, reduzierte Dichteoperator des Atoms  $\hat{\rho}_A^Q$

lautet

$$\begin{aligned}
 \hat{\rho}_A^Q &= \sum_{\substack{x'=x_1, x^{2'}=x, \dots \\ \dots, x^{Q'}=x^{(Q-1)'}}}^{x_N} \sum_{\{|p\rangle\}_0} \left| \Phi_p^{x' \dots x^{Q'}} \right|^2 |p\rangle \langle p| \\
 &+ \sum_{\substack{x'=x_1, x^{2'}=x, \dots \\ \dots, x^{(Q-1)'}=x^{(Q-2)'}}}^{x_N} \sum_{\{|r\rangle\}_1} \left| \Phi_r^{x' \dots x^{(Q-1)'}} \right|^2 |r\rangle \langle r| \\
 &+ \dots \\
 &+ \sum_{x'=x_1}^{x_N} \sum_{\{|s\rangle\}_{Q-1}} \left| \Phi_s^{x'} \right|^2 |s\rangle \langle s| + \sum_{\{|u\rangle\}_Q} \left| \Phi_u \right|^2 |u\rangle \langle u| \\
 &= \sum_{v=0}^Q \sum_{\{|m\rangle\}_v} \langle |m\rangle \langle m| \rangle |m\rangle \langle m|. \tag{4.15}
 \end{aligned}$$

Hierbei ist  $\langle |m\rangle \langle m| \rangle$  der in Gleichung (3.3) definierte Erwartungswert der Besetzung des atomaren Zustandes  $|m\rangle$  im Zustand  $|\Psi\rangle_Q$ . Der reduzierte Dichteoperator  $\hat{\rho}_A^Q$  ist somit bemerkenswerterweise in der Produktbasis der Eigenzustände des freien Atoms und der Fockzustände bereits diagonal, mit der Besetzung der atomaren Zustände  $\langle |m\rangle \langle m| \rangle$  als Eigenwerte. Mit anderen Worten: Alle Kohärenzen<sup>1</sup> in Gleichung (4.15) verschwinden, der Dichteoperator  $\hat{\rho}_A^Q$  beschreibt ein rein statistisch gemischtes Ensemble der atomaren Zustände. Dies liegt daran, dass der Zustand  $|\Psi\rangle_Q$  keine Superposition von Zuständen verschiedener Anregungszahlen  $\mathcal{C}$  darstellt, sondern genau einem dieser Unterräume, nämlich dem mit Anregungszahl  $Q$ , angehört.

Mit den Gleichungen (4.11), (4.12) und (4.15) ergeben sich die Schmidt-Zahl  $K_Q$  und die von Neumann Entropie  $S_Q$  im Zustand  $|\Psi\rangle_Q$  zu

$$K_Q = \sum_{v=0}^Q \sum_{\{|m\rangle\}_v} \frac{1}{\langle |m\rangle \langle m| \rangle^2}, \tag{4.16}$$

und

$$S_Q = - \sum_{v=0}^Q \sum_{\{|m\rangle\}_v} \langle |m\rangle \langle m| \rangle \log_2(\langle |m\rangle \langle m| \rangle). \tag{4.17}$$

## 4.3 Verschränkung in einem eindimensionalen Wellenleiter mit einem eingebetteten $\Lambda$ -System

### 4.3.1 Das Modell

Im Folgenden untersuche ich die Verschränkung zwischen einem 1D Wellenleiter und einem in den Wellenleiter eingebetteten  $\Lambda$ -System, die erzeugt wird, wenn ein einzelnes Photon an dem Atom gestreut wird. Anfänglich sollen sich Atom und Wellenleiter in einem Produktzustand befinden, wobei

<sup>1</sup>Mit Kohärenzen werden die nichtdiagonalen Matrixelemente des Dichteoperators bezeichnet.

### 4.3 Verschränkung in einem eindimensionalen Wellenleiter mit einem eingebetteten $\Lambda$ -System

sich das Atom nur in einem seiner unteren Zustände befinden soll. Dies entspricht gemäß Kapitel 3 einem  $1\text{KF}^2$ . Ich werde dabei, analog zum Vorgehen in Kapitel 3, den Fokus auf die Unterschiede bei der Erzeugung der Verschränkung im Fall stationärer Streuung eines einzelnen Photons zu dem eher realistischen Fall der Streuung eines Einzelphotonwellenpakets legen und dabei verschiedene Einhüllende des Wellenpakets betrachten.

Ich modelliere den Wellenleiter mit NNWW. Der Hamiltonoperator  $\hat{H}_{\text{EM}}$  lautet entsprechend Gleichung (1.88)

$$\hat{H}_{\text{EM}} = \sum_{x=x_1}^{x_N} \hbar\omega_0 \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_x + J \sum_{x=x_1}^{x_{N-1}} \left( \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_{x+\alpha} + \hat{a}_{x+\alpha}^\dagger \hat{a}_x \right). \quad (4.18)$$

Der Hamiltonoperator  $\hat{H}_A$  eines freien  $\Lambda$ -Systems ist nach Gleichung (1.69) gegeben

$$\hat{H}_A = E_1 |1\rangle\langle 1| + (E_1 + E_{21}) |2\rangle\langle 2| + (E_1 - \delta) |3\rangle\langle 3|. \quad (4.19)$$

Analog zum Vorgehen in Abschnitt 3.2.1 wähle ich die Anzahl der Gitterplätze  $N$ , aus denen der Wellenleiter modelliert wird, ungerade. Der Ort  $x_A$ , an dem das Atom in den Wellenleiter eingebettet ist, sei hierbei im Zentrum des Wellenleiters. Der Hamiltonoperator  $\hat{H}_{\text{LM}}$  der Wechselwirkung der Wellenleiterphotonen mit dem Atom ist dann gemäß Gleichung (3.21)

$$\hat{H}_{\text{LM}} = \sum_{l=1,3} V_l \left( \hat{a}_{x_A} |2\rangle\langle l| + |l\rangle\langle 2| \hat{a}_{x_A}^\dagger \right). \quad (4.20)$$

Der allgemeine Zustand in diesem System, der nur eine Anregung enthält, lautet nach Gleichung (3.1)

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{x=x_1}^{x_N} \sum_{l=1,3} \phi_l^x(t) \hat{a}_x^\dagger |0, l\rangle + \phi_2(t) |0, 2\rangle. \quad (4.21)$$

Hierbei sind die  $\{\phi_l^x(t)\}$  und  $\phi_2(t)$  identisch mit den entsprechenden  $\{\Phi_s^x(t)\}$  und  $\{\Phi_u(t)\}$  des allgemeinen Zustands aus Gleichung (4.13), da die Basisfockzustände  $\{(\hat{a}_x^\dagger)^\varsigma |0\rangle\}$ , mit  $\varsigma \in \{0, 1\}$  bereits normiert sind<sup>3</sup>.

Mit den Gleichungen (4.15) und (4.21) ergibt sich der reduzierte Dichteoperator  $\hat{\rho}_A^1$  des  $\Lambda$ -Atoms im Unterraum einer Anregung zu

$$\hat{\rho}_A^1(t) = \langle 1| \langle 1|(t) \rangle |1\rangle\langle 1| + \langle 2| \langle 2|(t) \rangle |2\rangle\langle 2| + \langle 3| \langle 3|(t) \rangle |3\rangle\langle 3|, \quad (4.22)$$

mit

$$\langle l| \langle l|(t) \rangle = \sum_{x=x_1}^{x_N} |\phi_l^x(t)|^2, \quad \text{mit } l \in \{1, 3\}, \quad (4.23a)$$

$$\langle 2| \langle 2|(t) \rangle = |\phi_2(t)|^2. \quad (4.23b)$$

Wellenleiter und Atom sind aufgrund der Gleichungen (4.16) und (4.17) maximal miteinander verschränkt, wenn die Schmidt-Zahl  $K_1 = 3$  beziehungsweise die von Neumann Entropie  $S_1 = \log_2(3)$

<sup>2</sup>Vergleiche Abschnitt 3.2.3.

<sup>3</sup>Es gilt meistens  $\sqrt{1} = 1$ .

betragen. Um dies zu erreichen müssten alle drei atomaren Zustände  $|1\rangle$ ,  $|2\rangle$  und  $|3\rangle$  zu  $1/3$  besetzt sein. Bei den folgenden Untersuchungen betrachte ich Streuprobleme im Unterraum einer Anregung, bei denen das Atom anfangs nicht angeregt ist. Zustände, bei denen die Besetzung des angeregten Zustands  $|2\rangle$  für Zeiten  $t \rightarrow \infty$  nicht verschwindet, können unter diesen Anfangsbedingungen nicht angeregt werden. Solche Zustände sind zum Beispiel *gebundene Atom-Photon-Zustände*<sup>4</sup> [66, 67, 81]. Aus diesem Grund sind die maximal erreichbaren Werte der beiden Verschränkungsmaße  $K_1^{\max} = 2$  und  $S_1^{\max} = 1$  im Grenzfall  $t \rightarrow \infty$ . Dies bedeutet für die atomaren Besetzungszahlen

$$\langle |1\rangle\langle 1|(t \rightarrow \infty) \rangle = \langle |3\rangle\langle 3|(t \rightarrow \infty) \rangle = \frac{1}{2}. \quad (4.24)$$

### 4.3.2 Stationäre Lösung

In diesem Abschnitt präsentiere ich die Lösung des stationären Streuproblems im 1KF, um daraus eine Bedingung zum Erreichen maximaler Verschränkungswerte für  $t \rightarrow \infty$  abzuleiten. Im 1KF trifft das einfallende Photon, ohne Beschränkung der Allgemeinheit, im Kanal 1 auf das Atom. Analog zum Vorgehen in Abschnitt 3.2.3 setze ich den allgemeinen Zustand aus Gleichung (4.21) in die zeitabhängige Schrödingergleichung aus Gleichung (1.31) ein und erhalte die Bewegungsgleichungen (3.24). Für diese Bewegungsgleichungen wähle ich den zeitharmonischen Ansatz analog zu Gleichung (3.30)

$$\phi_2(t) = e^{-i\frac{E_k t}{\hbar}} f_2, \quad (4.25a)$$

$$\phi_l^x(t) = e^{-i\frac{E_k t}{\hbar}} f_l^x, \quad \text{mit } l \in \{1, 3\}. \quad (4.25b)$$

Um nun die Lösung für den 1KF zu finden, nutze ich schließlich den Ansatz

$$f_1^x = \begin{cases} e^{+ik\alpha x} + r_1 e^{-ik\alpha x}, & \text{für } x/\alpha < x_A/\alpha, \\ t_1 e^{+ik\alpha x}, & \text{für } x/\alpha > x_A/\alpha, \end{cases} \quad (4.26a)$$

$$f_3^x = \begin{cases} \xi e^{-ik_3\alpha x}, & \text{für } x/\alpha < x_A/\alpha, \\ \xi e^{+ik_3\alpha x}, & \text{für } x/\alpha > x_A/\alpha, \end{cases} \quad (4.26b)$$

mit der Annahme, dass  $0 \leq k \leq \pi/\alpha$ . Es ergibt sich für den Transmissionskoeffizienten  $t_1$  und den Reflexionskoeffizienten  $r_1$  im Kanal 1

$$t_1 = \left( 1 - \frac{i V_1^2 / \sqrt{1 - \left( \frac{\hbar\omega_k - \hbar\omega_0}{2J} \right)^2}}{2J (\hbar\omega_k - E_{21}) - i V_3^2 / \sqrt{1 - \left( \frac{\delta + \hbar\omega_k - \hbar\omega_0}{2J} \right)^2}} \right)^{-1}, \quad (4.27a)$$

$$r_1 = - \left( 1 + \frac{2J (\hbar\omega_k - E_{21}) - i V_3^2 / \sqrt{1 - \left( \frac{\delta + \hbar\omega_k - \hbar\omega_0}{2J} \right)^2}}{i V_1^2 / \sqrt{1 - \left( \frac{\hbar\omega_k - \hbar\omega_0}{2J} \right)^2}} \right)^{-1}. \quad (4.27b)$$

<sup>4</sup>Vergleiche Abschnitt 5.2.2.

### 4.3 Verschränkung in einem eindimensionalen Wellenleiter mit einem eingebetteten $\Lambda$ -System

Aufgrund der Wahrscheinlichkeitserhaltung muss  $|t_1|^2 + |r_1|^2 + 2|t_3|^2 = 1$  gelten. Dabei ist  $|t_3|^2$  die in Kanal 3 in beide Richtungen isotrop transmittierte und somit in diesem Kanal propagierende Strahlung. Da der Ansatz aus Gleichung (4.26) auch nichtpropagierende Lösungen in Kanal 3 mit einschließt, kann nur  $|t_3|^2 \neq |\xi|^2$  gelten. Um in Kanal 3 propagierende Lösungen zu erhalten, muss

$$2|J| > |\delta + \hbar\omega_k - \hbar\omega_0|, \quad (4.28)$$

gelten<sup>5</sup>. Dies ist ein Resultat, welches der nach oben und unten beschränkten Bandstruktur des Wellenleiters mit Bandbreite  $4|J|$  zuzurechnen ist, vergleiche Gleichung (1.89) und Abbildung 1.5.

Entsprechend der Definitionen der Observablen in Abschnitt 3.2.1, die aus den Transportsimulationen berechnet werden können, ergibt sich im 1KF

$$T_1 + R_1 = \langle |1\rangle \langle 1| (t_{\max}) \rangle, \quad (4.29a)$$

$$2T_3 = \langle |3\rangle \langle 3| (t_{\max}) \rangle. \quad (4.29b)$$

Die Zeit  $t_{\max}$  in den Simulationen entspricht  $t \rightarrow \infty$  in Gleichung (4.24). Das bedeutet, maximale Verschränkung ist in den Simulationen erreicht, wenn  $T_1 + R_1 = 1/2$ . Auf die Transmissions- und Reflexionskoeffizienten der stationären Rechnung übertragen bedeutet dies

$$|t_1|^2 + |r_1|^2 \stackrel{!}{=} \frac{1}{2}. \quad (4.30)$$

Im Folgenden lege ich mich auf die Kopplungskonstante  $V_3$  als den Parameter fest, der im Laufe der Simulationen in Abhängigkeit der weiteren Systemparameter angepasst wird, so dass das System die Bedingung aus Gleichung (4.30) erfüllt. Ich setze daher die Koeffizienten aus Gleichung (4.27) in Gleichung (4.30) ein, löse diese Gleichung zunächst nach  $V_3^2$  auf und erhalte

$$V_3^2 = |\hbar\omega_k - E_{21}| \sqrt{-\Gamma} + V_1^2 \sqrt{\frac{\Gamma}{4J^2 - (\hbar\omega_k - \hbar\omega_0)^2}}, \quad (4.31)$$

mit

$$\Gamma = (2J + \delta + \hbar\omega_k - \hbar\omega_0)(2J - \delta - \hbar\omega_k + \hbar\omega_0). \quad (4.32)$$

Da  $V_3^2$  eine reelle Zahl<sup>6</sup> sein muss und da aufgrund von Gleichung (4.28)  $\Gamma > 0$  gilt, muss der erste Term der rechten Seite in Gleichung (4.31) verschwinden. Dies ist nur möglich für  $|\hbar\omega_k - E_{21}| = 0$ , also wenn das im Kanal 1 einlaufende Photon die Resonanzbedingung für den Übergang zwischen  $|1\rangle$  und  $|2\rangle$  erfüllt. Es ergibt sich somit aus Gleichung (4.31)

$$V_3 = V_1 \left( \frac{(2J + \delta + \hbar\omega_k - \hbar\omega_0)(2J - \delta - \hbar\omega_k + \hbar\omega_0)}{4J^2 - (\hbar\omega_k - \hbar\omega_0)^2} \right)^{\frac{1}{4}}. \quad (4.33)$$

Wenn also die Energie des einlaufenden Photons resonant zur Übergangsenergie  $E_{21}$  gestimmt ist und die Kopplungskonstante  $V_3$  entsprechend Gleichung (4.33) gewählt und Gleichung (4.28) beachtet wird, sollte in den Simulationen die maximale Verschränkung zwischen Licht im Wellenleiter und  $\Lambda$ -Atom erzeugt werden. Aus Gleichung (4.33) folgt, dass hierzu im entarteten System, also bei  $\delta = 0$ , die Kopplungskonstanten  $V_1$  und  $V_3$  identisch sein müssen.

<sup>5</sup>Vergleiche Abschnitt 3.3.4.

<sup>6</sup>Im Falle komplexer Kopplungskonstanten wäre in allen Formeln in diesem Abschnitt  $V_l^2$  durch  $|V_l|^2$  mit  $l \in \{1, 3\}$  zu ersetzen. Somit müsste auch in diesem Fall die rechte Seite von Gleichung (4.31) eine reelle Zahl ergeben, was somit auf die Resonanzbedingung für das Photon in Kanal 1 führt.

Einhüllende $\varphi_x^{\eta_x, x_z}$	Bezeichnung
$\propto \exp\left(-\frac{4 \ln(2)(x-x_z)^2}{\eta_x^2}\right)$	Gauß
$\propto \left(\cos\left(\frac{\pi(x-x_z)}{\eta_x}\right) + 1\right) \Theta( \eta_x  -  x - x_z )$	Cosinus
$\propto \left(\cos\left(\frac{2 \arccos(\sqrt{2}-1)(x-x_z)}{\eta_x}\right) + 1\right)^2 \Theta\left(\left \frac{\eta_x \pi}{(2 \arccos(\sqrt{2}-1))}\right  -  x - x_z \right)$	Quadrierter Cosinus
$\propto \operatorname{sech}\left(\frac{2 \ln(2+\sqrt{3})(x-x_z)}{\eta_x}\right)$	Sekans Hyperbolicus
$\propto \operatorname{sech}^2\left(\frac{2 \ln(\sqrt{2}+1)(x-x_z)}{\eta_x}\right)$	Logistische Verteilung

Tabelle 4.1: Die verschiedenen Einhüllenden  $\varphi_x^{\eta_x, x_z}$ , die ich für die Simulationen verwendet habe. Die Halbwertsbreite im Ortsraum ist mit  $\eta_x$  bezeichnet. Für die Heaviside-Stufenfunktion definiere ich an dieser Stelle  $\Theta(0) = 1$ .

### 4.3.3 Erzeugung von Verschränkung durch Streuung von Einzelphotonwellenpaketen am $\Lambda$ -System

Im Folgenden untersuche ich die Erzeugung von Verschränkung zwischen Atom und Wellenleiter durch die Streuung eines Einzelphotonwellenpakets am  $\Lambda$ -System in einem 1KF mit dem Atom in Zustand  $|1\rangle$ . Dabei interessiere ich mich insbesondere für den Einfluss der Form der Einhüllenden des Wellenpakets auf den Verschränkungsgrad, gemessen durch die Schmidt-Zahl  $K_1$  beziehungsweise die von Neumann Entropie  $S_1$ . Die hierzu notwendigen Transportsimulationen verlaufen wie in Abschnitt 3.2.1 beschrieben. Ein Anfangszustand  $|\Psi(t_0)\rangle$  mit  $t_0 = 0$  wird in der Zeit bis zu einem Zeitpunkt  $t_{\max}$  entwickelt, zu dem die Streuung des Wellenpakets am Atom abgeschlossen ist. Aus den Simulationsdaten werden die Besetzungszahlen des Atoms extrahiert und daraus die Schmidt-Zahl  $K_1(t_{\max})$  beziehungsweise die von Neumann Entropie  $S_1(t_{\max})$  nach den Gleichungen (4.16) beziehungsweise (4.17) berechnet. Hinsichtlich der Systemparameter wähle ich die Kopplungskonstante  $V_3$  entsprechend Gleichung (4.33), so dass auf Grundlage der stationären Lösung aus Abschnitt 4.3.2 die Bedingung für die maximale Verschränkung erfüllt ist. Um in Kanal 3 propagierende Lösungen zu erhalten, wähle ich die restlichen Parameter derart, dass die Bedingung aus Gleichung (4.28) ebenso erfüllt ist.

Der Anfangszustand  $|\Psi(t_0)\rangle$  der Simulationen lautet, analog zu dem aus Gleichung (3.22),

$$|\Psi(t_0)\rangle = \sum_{x=x_1}^{x_N} \varphi_x^{\eta_x, x_z} e^{ik_0 x} \hat{a}_x^\dagger |0, 1\rangle. \quad (4.34)$$

Hierin beschreibt  $\varphi_x^{\eta_x, x_z}$  die Form der Einhüllenden des Wellenpakets und  $0 < k_0 \leq \pi$  ist die mittlere Kreiswellenzahl des Wellenpakets. Im Gegensatz zur „monochromatischen“, stationären Lösung weist der Anfangszustand aus Gleichung (4.34) für räumlich endliche Einhüllende  $\varphi_x^{\eta_x, x_z}$  eine endliche spektrale Breite auf. Daher ist zu erwarten, dass die Erzeugung von Verschränkung durch die Streuung

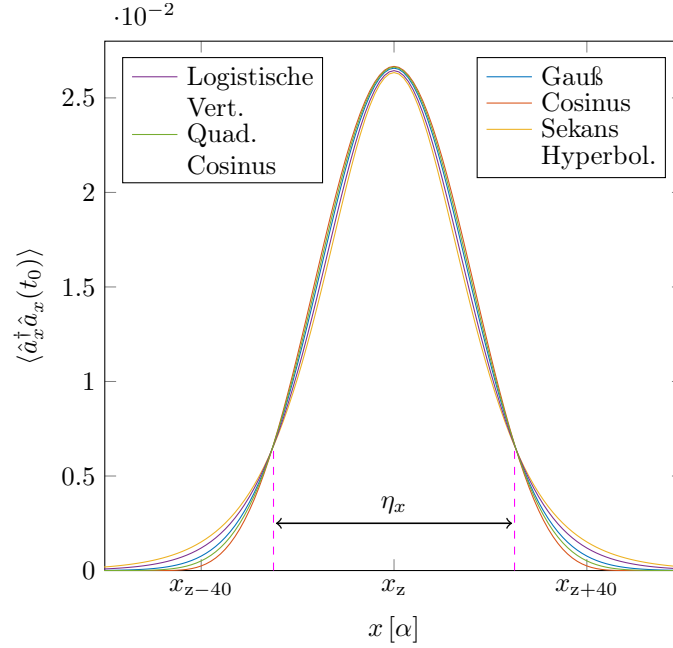


Abbildung 4.1: Besetzung des Wellenleiters  $\langle \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_x(t_0) \rangle \equiv |\varphi_x^{\eta_x, x_z}|^2$  im Ortsraum um den Gitterplatz  $x_z$  für die bei den Simulationen verwendeten Einhüllenden  $\varphi_x^{\eta_x, x_z}$  mit  $\eta_x = 50\alpha$  im Anfangszustand  $|\Psi(t_0)\rangle$ . Die gestrichelten Linien (magenta) markieren  $\eta_x$ . Weitere Details siehe Text.

des Pulses nicht maximal effizient ist, also  $K_1(t_{\max}) \leq 2$  und  $S_1(t_{\max}) \leq 1$ . Deshalb vergleiche ich im Folgenden die Effizienz bei der Erzeugung von Verschränkung für verschiedene Einhüllende  $\varphi_x^{\eta_x, x_z}$  gleicher Halbwertsbreite (engl. *full width at half maximum (FWHM)*)  $\eta_x$  im Ortsraum. Die in der hier präsentierten Studie verwendeten Einhüllenden sind zunächst ohne Berücksichtigung auf deren Realisierbarkeit im Experiment gewählt. Es geht hier vielmehr darum grundlegende Abhängigkeiten der Verschränkungserzeugung durch unterschiedliche Einhüllende zu klären.

In Tabelle 4.1 sind die verschiedenen Einhüllenden, die ich für die Untersuchungen verwendet habe, mit ihren Bezeichnungen in Abhängigkeit der FWHM  $\eta_x$  im Ortsraum angegeben. Abbildung 4.1 zeigt die photonische Besetzung  $\langle \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_x(t_0) \rangle$  der Gitterplätze des Wellenleiters im Ortsraum im Anfangszustand aus Gleichung (4.34) für diese Einhüllenden im Falle  $\eta_x = 50\alpha$ .

#### Der Einfluss der Halbwertsbreite $\eta_x$ und der Kreiswellenzahl $k_0$ auf die Verschränkungserzeugung

Abbildung 4.2 zeigt in doppeltlogarithmischer Darstellung die Differenzen  $\Delta_K = 2 - K_1(t_{\max})$  beziehungsweise  $\Delta_S = 2 - S_1(t_{\max})$  zwischen den oben vorgestellten Maßen für Verschränkung und ihrem stationären Maximum über der FWHM  $\eta_x$  des Wellenpakets im Anfangszustand für ein entartetes  $\Lambda$ -System für die fünf unterschiedlichen Einhüllenden. Die mittleren Kreiswellenzahlen in diesem Beispiel sind  $k_0 = \pi/(2\alpha)$  in den Abbildungen 4.2a) und b) und  $k_0 = 3\pi/(4\alpha)$  in den Abbildungen 4.2c) und d).

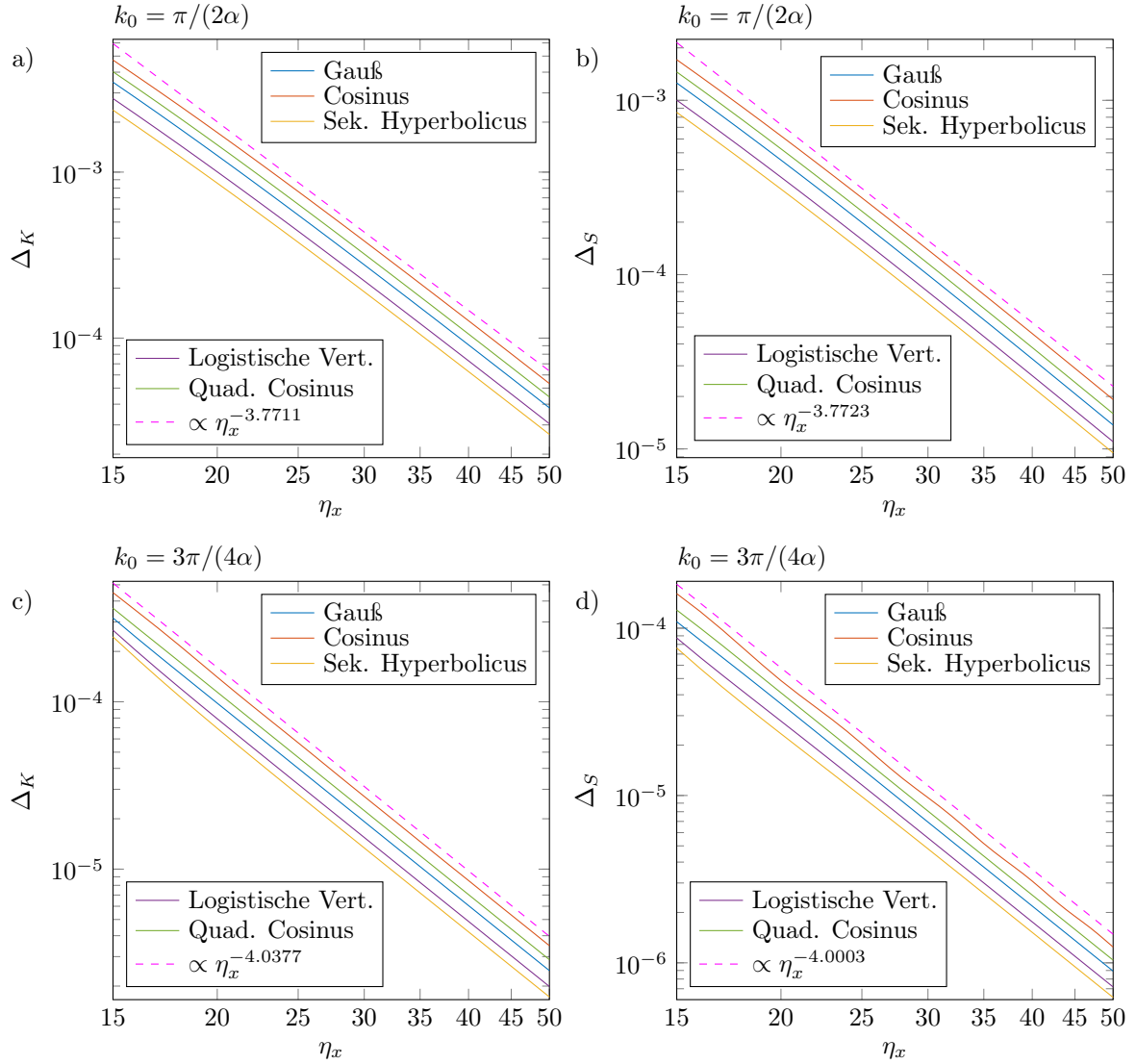


Abbildung 4.2: Die Differenzen  $\Delta_K$  und  $\Delta_S$  fr die verschiedenen Einhllenden  $\varphi_x^{\eta_x; x_z}$  als Funktion der FWHM  $\eta_x$  fr verschiedene mittlere Kreiswellenzahlen  $k_0$ . Die Simulationsparameter wurden entsprechend den Gleichungen (4.28) und (4.33) angepasst. Die brigen Simulationsparameter sind  $J < 0$ ,  $V_1 = |J|$ ,  $E_{21} = \hbar\omega_{k_0}$ ,  $\delta = 0$ ,  $x_z = 1499\alpha$ , der Wellenleiter wurde durch  $N = 5999$  Gitterpltze modelliert und das Atom am Gitterplatz  $x_A = 3000$  in den Wellenleiter eingebettet. Weitere Details siehe Text.



### 4.3 Verschränkung in einem eindimensionalen Wellenleiter mit einem eingebetteten $\Lambda$ -System

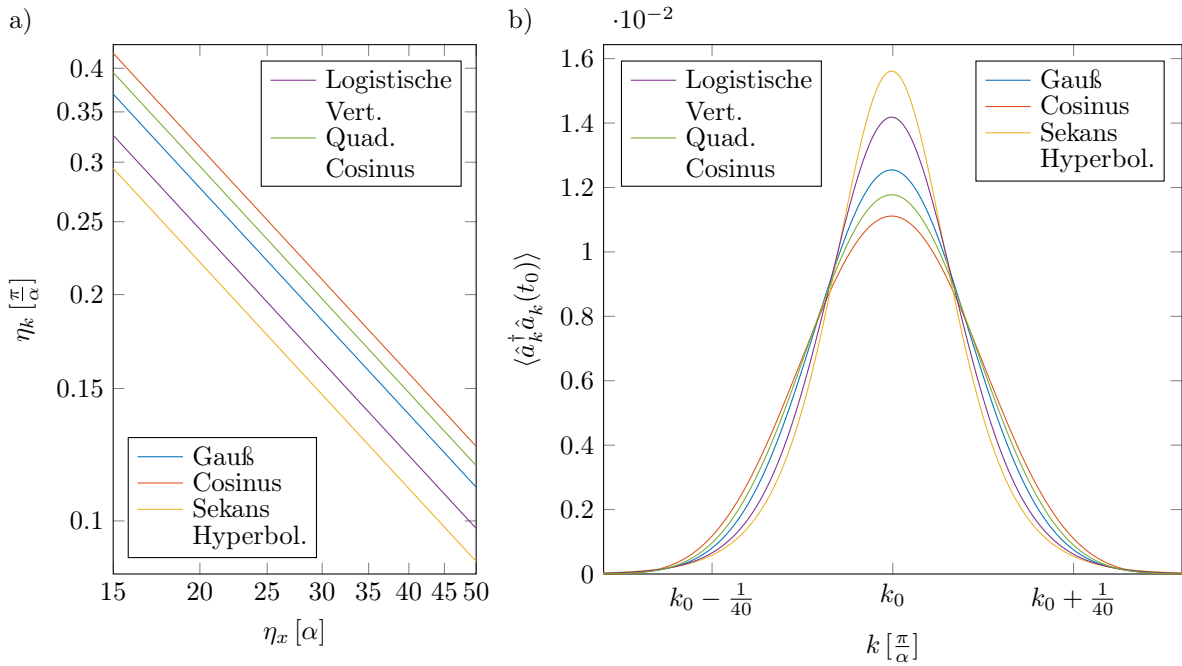


Abbildung 4.3: a) Die Breite  $\eta_k$  im  $k$ -Raum über der Breite  $\eta_x$  für verschiedene Einhüllende  $\varphi_x^{\eta_x, x_z}$ . b) Besetzung des Wellenleiters im  $k$ -Raum für die bei den Simulationen verwendeten Einhüllenden  $\varphi_x^{\eta_x, x_z}$  mit  $\eta_x = 50\alpha$  im Anfangszustand  $|\Psi(t_0)\rangle$ . Siehe Text für weitere Details.

Abbildung 4.2 lässt sich folgendermaßen interpretieren: Je kleiner  $\Delta_K$  beziehungsweise  $\Delta_S$  sind, desto näher liegt das Simulationsergebnis der Verschränkungserzeugung am Wert der stationären Rechnung aus Abschnitt 4.3.2. Die Größen  $\Delta_K$  und  $\Delta_S$  folgen der Abbildung 4.2 nach fallenden Potenzgesetzen in  $\eta_x$ . Die Exponenten dieser Potenzgesetze sind für alle Einhüllenden und Differenzen  $\Delta_K$  und  $\Delta_S$  über zwei Größenordnungen identisch und liegen bei etwa  $-3.8$  im Fall von  $k_0 = \pi/(2\alpha)$  und bei etwa  $-4.0$  im Fall von  $k_0 = 3\pi/(4\alpha)$ . Die Abhängigkeiten der Größen  $\Delta_K$  und  $\Delta_S$  von den verschiedenen Einhüllenden manifestieren sich entsprechend Abbildung 4.2 als Vorfaktoren in den Potenzgesetzen, die sich in jedem Fall als maximal für den Cosinus und minimal für den Sekans Hyperbolicus erweisen. Das bedeutet, dass bei der Verwendung des Sekans Hyperbolicus als Einhüllende bei der Streuung mehr Verschränkung erzeugt wird, als bei der Verwendung der anderen untersuchten Einhüllenden. Wird der Sekans Hyperbolicus verwendet, liegt das Ergebnis somit am nächsten an dem der stationären Rechnung.

Dieses Resultat lässt sich mit Hilfe von Abbildung 4.3a) erklären: Dort ist die FWHM  $\eta_k$  des Anfangszustandes  $|\Psi(t_0)\rangle$  aus Gleichung (4.34) im  $k$ -Raum über der FWHM  $\eta_x$  im Ortsraum doppeltlogarithmisch aufgetragen, wobei die Werte von  $\eta_k$  numerisch mittels einer Gitterfouriertransformation ermittelt wurden. Dieser Abbildung lässt sich entnehmen, dass  $\eta_k$  für die verschiedenen Einhüllenden  $\varphi_x^{\eta_x, x_z}$  in exakt der gleichen Weise Potenzgesetzen in  $\eta_x$  folgt, wie die Größen  $\Delta_K$  und  $\Delta_S$  in der Abbildung 4.2. Daher folgere ich, dass  $\Delta_K$  und  $\Delta_S$  und damit die Güte der Verschränkungserzeugung bei Streuprozessen für verschiedene Einhüllende gleicher FWHM  $\eta_x$  im Ortsraum durch die FWHM  $\eta_k$

der jeweiligen Einhüllenden im  $k$ -Raum festgelegt wird. Mit anderen Worten: Je schmaler ein Einzelphotonwellenpaket im  $k$ -Raum ist, desto näher liegt das Ergebnis der Verschränkungserzeugung am Resultat stationärer, „monochromatischer“ Rechnungen.

Abbildung 4.3b) zeigt die zu den aus Abbildung 4.1 korrespondierenden Erwartungswerte  $\langle \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k(t_0) \rangle$  der Besetzungen des Anfangszustandes  $|\Psi(t_0)\rangle$  im  $k$ -Raum für die verschiedenen Einhüllenden. Hier lassen sich die unterschiedlichen Breiten im  $k$ -Raum der im Ortsraum in Abbildung 4.1 sehr ähnlich anmutenden Einhüllenden  $\varphi_x^{\eta_x, x_z}$  deutlich erkennen.

Wie anhand von Abbildung 4.2 ersichtlich ist das Ergebnis für Anfangszustände mit  $k_0 = 3\pi/(4\alpha)$  qualitativ im Vergleich zu denen mit  $k_0 = \pi/(2\alpha)$  dasselbe. Quantitativ sind die Vorfaktoren in den Potenzgesetzen für  $\Delta_K$  und  $\Delta_S$  in  $\eta_x$  jedoch im Fall von  $k_0 = 3\pi/(4\alpha)$  um circa eine Größenordnung kleiner, als im Fall von  $k_0 = \pi/(2\alpha)$ . Der erreichte Grad der Verschränkung ist für Anfangszustände mit einer mittleren Kreiswellenzahl  $k_0 = 3\pi/(4\alpha)$  also näher am Ergebnis der stationären Rechnung, als für Anfangszustände mit  $k_0 = \pi/(2\alpha)$ . Dies lässt sich mit Hilfe der *Emissionszeiten*  $\tau_{1/3}(k_0)$  der beiden atomaren Übergänge erklären [57, 68, 94]. In den Referenzen [57, 94] wird gezeigt, dass die Observablen bei der Streuung eines Einzelphotonwellenpakets an einem Atom in einem 1D Wellenleiter *näher* an den entsprechenden Observablen einer stationären Rechnung liegen, je *kleiner* die Emissionszeiten

$$\tau_{1/3}(k_0) = \frac{\hbar^2 |v_g(k_0)|}{2\alpha V_{1/3}^2}, \quad (4.35)$$

sind. In dieser Gleichung ist  $v_g(k_0) \equiv \partial_k \omega_k|_{k=k_0}$  die Gruppengeschwindigkeit des eines Einzelphotonwellenpakets im Wellenleiter mit mittlerer Kreiswellenzahl  $k_0$ . Im Fall von  $k_0 = 3\pi/(4\alpha)$  sind die Emissionszeiten  $\tau_{1/3}(k_0)$  kleiner, als im Fall von  $k_0 = \pi/(2\alpha)$ , da sich mit der Dispersionsrelation aus Gleichung (1.89)

$$|v_g(3\pi/(4\alpha))| = \sqrt{2}|J|\alpha/\hbar < 2|J|\alpha/\hbar = |v_g(\pi/(2\alpha))| \quad (4.36)$$

ergibt. Dieser Effekt tritt also nur auf, weil die Dispersionsrelation des Wellenleiters nichtlinear verläuft und Bandkanten aufweist, in deren Umgebung die Gruppengeschwindigkeit  $v_g(k)$  naturgemäß kleiner im Betrag ist, als in der Bandmitte. Daher weichen die Ergebnisse der Simulationen im Fall von Einzelphotonwellenpaketen, deren mittlere Kreiswellenzahlen  $k_0$  näher an der Bandkante des Wellenleiterbandes liegen, geringer von den stationären Rechnungen ab, als die Ergebnisse im Fall von Einzelphotonwellenpaketen, bei denen die  $k_0$  näher an der beziehungsweise direkt in der Bandmitte liegen. Letzteres trifft im vorliegenden System für  $k_0 = \pi/(2\alpha)$  zu.

### Der Einfluss der Verstimmung $\delta$ auf die Verschränkungserzeugung

Bis hierhin habe ich die Erzeugung von Verschränkung im Fall eines entarteten  $\Lambda$ -Systems untersucht. In diesem Abschnitt präsentiere ich die Ergebnisse von Studien für den Fall nichtentarteter  $\Lambda$ -Atome. Ich beschränke mich hierbei als Verschränkungsmaß auf die Schmidt-Zahl  $K_1(t_{\max})$  beziehungsweise die Differenz  $\Delta_K$  vom Wert 2 aus der stationären Lösung. Die Verwendung der von Neumann Entropie  $S_1(t_{\max})$  wäre genauso möglich, wie sich oben jedoch gezeigt hat, erwächst jedoch aus der Verwendung zweier Verschränkungsmaße kein Mehrwert an Erkenntnisgewinn.

Die Abbildungen 4.4 und 4.5 zeigen die Differenz  $\Delta_K$  als Funktion der Verstimmung  $\delta$  für Anfangszustände nach Gleichung (4.34) mit den oben verwendeten fünf Einhüllenden  $\varphi_x^{\eta_x, x_z}$ . Abbildung 4.4

### 4.3 Verschrnkung in einem eindimensionalen Wellenleiter mit einem eingebetteten $\Lambda$ -System

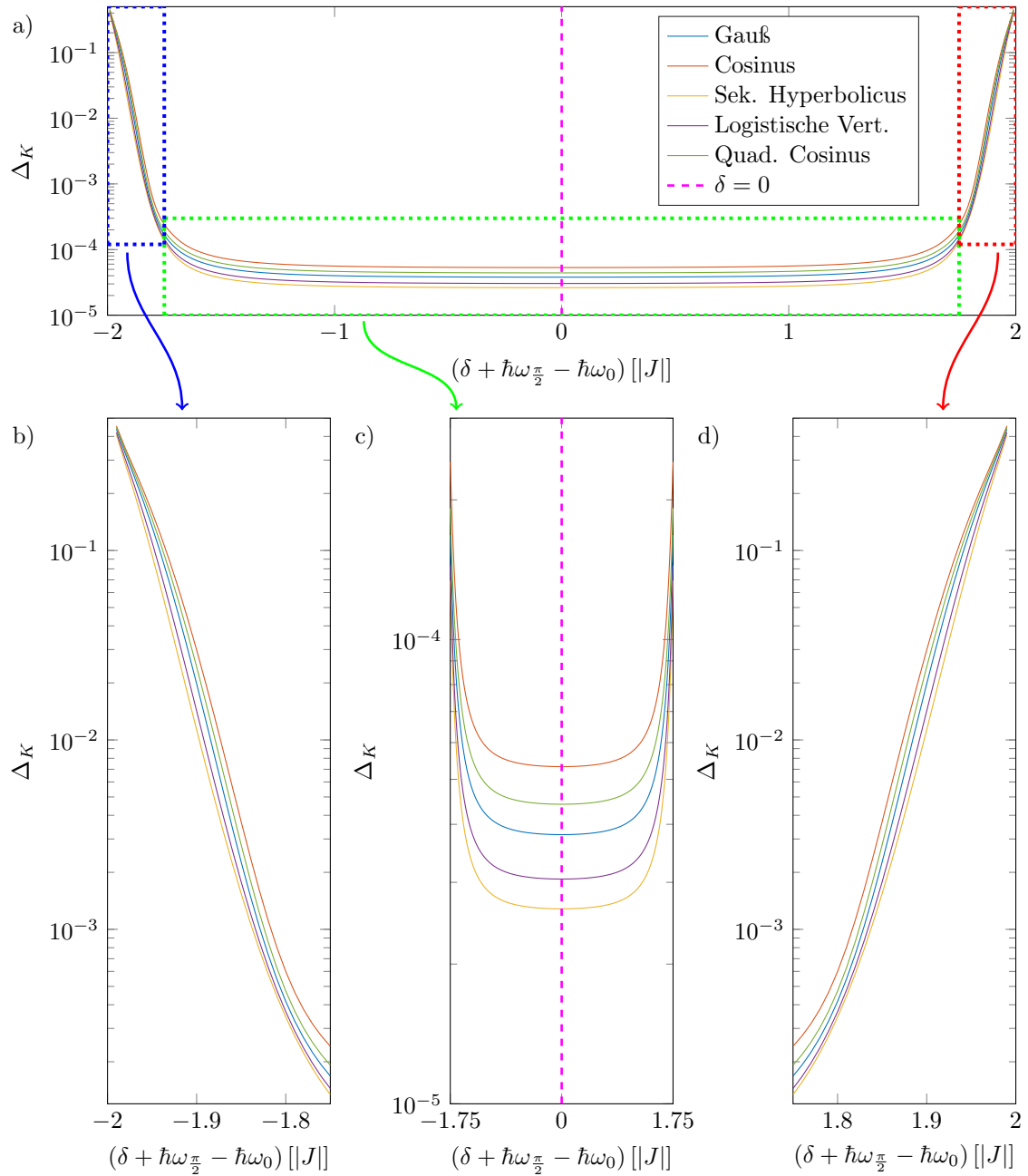


Abbildung 4.4: Die Differenz  $\Delta_K$  ber der Verstimmung  $\delta$  fr eine mittlere Kreiswellenzahl  $k_0 = \pi/(2\alpha)$  und fr die verschiedenen Einhllenden  $\varphi_x^{\eta_x, x_z}$ . Die Kopplungskonstante  $V_3$  wurde entsprechend Gleichung (4.33) angepasst. Die brigen Simulationsparameter sind  $J < 0$ ,  $V_1 = |J|$ ,  $E_{21} = \hbar\omega_{k_0}$ ,  $x_z = 1499\alpha$ , der Wellenleiter wurde durch  $N = 5999$  Gitterpltze modelliert und das Atom am Gitterplatz  $x_A = 3000$  in den Wellenleiter eingebettet. Weitere Details siehe Text.

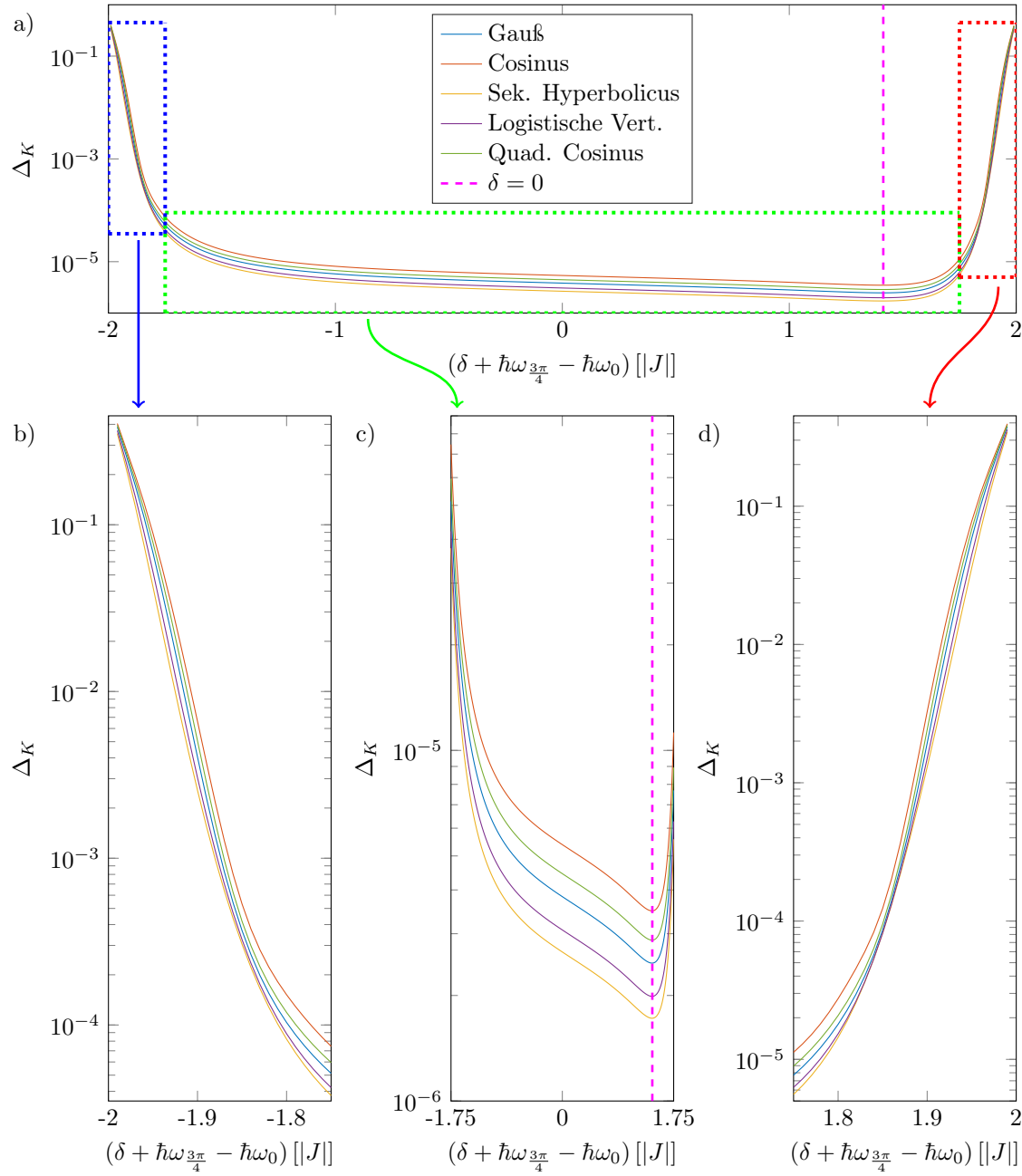


Abbildung 4.5: Die Differenz  $\Delta_K$   ber der Verstimmung  $\delta$  f r eine mittlere Kreiswellenzahl  $k_0 = 3\pi/(4\alpha)$  und f r die verschiedenen Einh llenden  $\varphi_x^{\eta_x, x_z}$ . Die Kopplungskonstante  $V_3$  wurde entsprechend Gleichung (4.33) angepasst. Die  brigen Simulationsparameter sind  $J < 0$ ,  $V_1 = |J|$ ,  $E_{21} = \hbar\omega_{k_0}$ ,  $x_z = 1499\alpha$ , der Wellenleiter wurde durch  $N = 5999$  Gitterpl tze modelliert und das Atom am Gitterplatz  $x_A = 3000$  in den Wellenleiter eingebettet. Weitere Details siehe Text.

zeigt dies für den Fall einer mittleren Kreiswellenzahl  $k_0 = \pi/(2\alpha)$  und Abbildung 4.5 für den Fall, dass  $k_0 = 3\pi/(4\alpha)$  gilt. Die Skalen der Abszissenachsen der Abbildungen sind jeweils um  $\hbar\omega_{k_0} - \hbar\omega_0$  versetzt, so dass sich der Bereich, in dem die Bedingung für propagierende Lösungen in Kanal 3 aus Gleichung (4.28) erfüllt ist, direkt ablesen lässt.

In den Abbildungen 4.4b) und c), sowie den Abbildungen 4.5b) und c) lässt sich erkennen, dass die Ausbeute an erzeugter Verschränkung im Vergleich zum stationären Fall kleiner wird, je näher  $|\delta + \hbar\omega_k - \hbar\omega_0|$  an die halbe Bandbreite  $2|J|$  des Wellenleiters heran reicht. Dabei ergibt sich für die Differenz  $\Delta_K \approx 1$  im Falle, dass  $|\delta + \hbar\omega_k - \hbar\omega_0| \approx 2|J|$  gilt. Zur Erinnerung: Ist  $\Delta_K = 1$ , so sind das Atom und der Zustand des Lichtfeldes im Wellenleiter in einem Produktzustand. Dies lässt sich erneut mit Hilfe der Emissionszeiten  $\tau_{1/3}(k_0)$  erklären: Aus Gleichung (4.33) folgt  $V_3 \rightarrow 0$  für  $|\delta + \hbar\omega_k - \hbar\omega_0| \rightarrow 2|J|$  und somit  $\tau_3(k_0) \rightarrow \infty$  in Gleichung (4.35).

Aus den Abbildungen 4.4d) und Abbildungen 4.5d) lässt sich entnehmen, dass die maximale Verschränkung für  $\delta = 0$ , also für das entartete  $\Lambda$ -System, erzielt wird. Auch wenn dies bedeutet, dass die Energie des „einfallenden“ Photons<sup>7</sup> in diesem Fall resonant zur Übergangsenergie zwischen den Zuständen  $|2\rangle$  und  $|3\rangle$  gestimmt ist, lässt sich dieses Resultat *nicht* als ein Resonanzeffekt deuten. Im Falle eines Resonanzeffektes führte eine erhöhte Wechselwirkungswahrscheinlichkeit zwischen Atom und Photon aufgrund gleicher Energien zu dem genannten Ergebnis. Da der Anfangszustand aus Gleichung (4.34) nur im Unterraum des Zustands  $|1\rangle$  „lebt“, ist die Atom-Photon-Wechselwirkungswahrscheinlichkeit unabhängig von der Energiedifferenz zwischen den Zuständen  $|2\rangle$  und  $|3\rangle$ , was somit die Deutung eines minimalen  $\Delta_K$  für  $\delta = 0$  als Resonanzeffekt nicht zulässt. Vielmehr lässt sich dies erneut auf die Größe  $\tau_3(k_0)$  aus Gleichung (4.35) zurückführen, welche minimal wird für  $\delta = 0$ , da  $V_3$  aus Gleichung (4.33) für diesen Wert maximal wird.

Grundsätzlich lässt sich in den Abbildungen 4.4 und 4.5 erneut der Einfluss der Bandstruktur der Dispersionsrelation im Hinblick auf die Lage der mittleren Kreiswellenzahl  $k_0$  des Anfangszustandes  $|\Psi(t_0)\rangle$  im Band nachvollziehen. Die Kreiswellenzahl  $k_0 = \pi/(2\alpha)$  liegt, wie oben erwähnt, im Zentrum des Bandes. Daher ist Abbildung 4.4 symmetrisch bezüglich  $\delta = 0$ , also wenn das  $\Lambda$ -System entartet ist, während Abbildung 4.5 diesbezüglich asymmetrisch ist. Es ergibt sich außerdem erneut Aufgrund des kleineren  $\tau_3(k_0)$ , dass das Minimum von  $\Delta_K$  kleiner und damit die Verschränkung stärker ist, wenn  $k_0$  näher an der Bandkante liegt, wie es auf den Fall  $k_0 = 3\pi/(4\alpha)$  im Vergleich zu  $k_0 = \pi/(2\alpha)$  zutrifft.

## 4.4 Zusammenfassung

In diesem Kapitel habe ich die Theorie zur Quantifizierung von Verschränkung zwischen dem Lichtfeld eines Wellenleiters und einem in diesen Wellenleiter eingebetteten Atoms auf Basis der Schmidt-Zerlegung präsentiert. Hierbei hat sich ergeben, dass die Besetzungszahlen der atomaren Zustände direkten Zugang zu Maße für Verschränkung, wie der Schmidt-Zahl oder der von Neumann Entropie bieten.

Mit Hilfe dieses Formalismus habe ich dann die Erzeugung der Verschränkung zwischen einem Photon im Wellenleiter und einem einzelnen  $\Lambda$ -System durch Streuung eines Einzelphotonwellenpakets an dem Atom für verschiedene Wellenpaketeinhüllende gleicher Ortsraumbreite untersucht. Dabei wurde

<sup>7</sup>Die Energie des „einfallenden“ Photons ist definiert durch den Erwartungswert  $\langle \Psi(t_0) | \hat{H}_{\text{EM}} | \Psi(t_0) \rangle = \hbar\omega_{k_0}$ .

#### *4 Die Schmidt-Zerlegung und Verschränkung im Kontext der Wellenleiterquantenelektrodynamik*

gezeigt, dass der erzielte Verschränkungsgrad maßgeblich durch die Breite des Wellenpakets im  $k$ -Raum und den Emissionszeiten der atomaren Übergänge bestimmt wird.

# 5 DYNAMIK DER PHOTONEMISSION ZWEIER ZWEINIVEAUSYSTEME IN EINEM EINDIMENSIONALEN WELLENLEITER

*In diesem Kapitel untersuche ich das Emissionsverhalten zweier gleichartiger 2NS, die in einen Wellenleiter mit NNWW eingebettet sind, in Abhängigkeit der Kopplungsstärke, der atomaren Übergangsenergie und des Abstandes der Atome im Wellenleiter. Es zeigt sich, dass die Emissionsdynamik in diesem System sowohl von der Anregung polaritonischer, als auch kavitätsartiger Eigenzustände abhängt. Letztere sind Zustände, die nur in Systemen mit bestimmten atomaren Abständen und Übergangsenergien auftreten und in denen die Atome und der Wellenleiter eine optische Kavität bilden, so dass die Strahlung zwischen den beiden Atomen gefangen ist.*

*Für den Fall, dass zunächst nur ein Atom im System angeregt ist demonstriere ich, unter welchen Umständen der Emissionsprozess dieses Atoms zu einer konstanten Besetzung beider Atome im Grenzfall langer Zeiten führt und unter welche Voraussetzungen gar keine Emission stattfindet. Außerdem zeige ich, unter welchen Umständen die beiden Atome miteinander „Quanten-Pong“ spielen.*

*Ich untersuche in diesem Kapitel außerdem kollektive Emissionsphänomene der beiden Atome. Dabei zeige ich, unter welchen Voraussetzungen zweiatomige Super- und Subradianz auftritt und wie diese Effekte mit dem atomaren Abstand in diesem 1D System skalieren.*

## 5.1 Einführung

Zwei an unterschiedlichen Orten in einen 1D Wellenleiter eingebettete 2NS bilden die einfachste Realisierung zweier verbundener Knoten in einem quanteninformationsverarbeitenden Netzwerk [7]. Um ein solches Netzwerk zu realisieren und für die Quanteninformationsverarbeitung [84–86] nutzen zu können, müssen die grundlegenden physikalischen Phänomene in solchen Systemen bekannt und verstanden sein. Dazu zählt insbesondere die Dynamik des Informationsaustausches zwischen den Knoten.

Seit den fünfziger Jahren des 20. Jahrhunderts ist bekannt, dass es in einem physikalischen System aus mehreren gleichartigen Emittlern zu kollektiven, kohärenten Emissionsphänomenen, wie der

Superradianz kommen kann [95]. Solche kollektiven Wechselwirkungen zwischen nur *zwei* einzelnen, mikroskopischen Quantensystemen in einer *3D* Umgebung wurden 1996 mit Hilfe einer Ionenfalle das erste Mal experimentell beobachtet [96]. Jüngst wurden kollektive Emissionseffekte zwischen zwei oder mehr Emittlern, die an einen *1D* Wellenleiter gekoppelt sind, beobachtet [97, 98].

In diesem Kapitel präsentiere ich die Ergebnisse von Studien des Emissionsverhalten zweier in einen Wellenleiter mit NNWW eingebetteten 2NS. Zu diesem Thema entsteht gleichzeitig eine weitere Doktorarbeit innerhalb der *AG TO&P*, in der das hier betrachtete System mit Hilfe analytischer Methoden der Quantenfeldtheorie untersucht wird [99]. Daher beschränke ich mich in dieser Arbeit auf die Diskussion von Ergebnissen, die ich mit Hilfe des in Kapitel 2 vorgestellten numerischen Frameworks gewonnen habe.

In Abschnitt 5.2 stelle ich den Hamiltonoperator, der das in diesem Kapitel untersuchte Modell beschreibt, vor. Ich gehe auf des Spektrum des Hamiltonoperators und seine Eigenzustände ein. Ich klassifiziere die Eigenzustände, da sich zeigen wird, dass deren parameterabhängige Existenz beziehungsweise *Nicht*-Existenz, großen Einfluss auf die Dynamik des untersuchten Systems hat.

Anschließend untersuche ich in Abschnitt 5.3 die Dynamik des Systems, wenn zunächst eines der beiden Atome angeregt ist. Dabei unterscheide ich zwischen den Regimes starker und schwacher Kopplung, da sich das System entsprechend unterschiedlich entwickelt. Dieser Teil der Untersuchungen bezieht sich somit auf die Frage, wie sich die Emission des angeregten Atoms auf das andere, zunächst im Grundzustand befindliche Atom am anderen Ort im Wellenleiter auswirkt. Dies ist nichts anderes als das grundlegende Prinzip für den Austausch von Informationen im oben erwähnten Quantennetzwerk.

In Abschnitt 5.4 untersuche ich die kollektive Emissionsdynamik für den Fall, dass beide Atome gemeinsam eine Anregung tragen. Dabei gehe ich auch auf Super- und Subradianz ein, die so nur in *1D* Systemen auftreten können. Zum Abschluss fasse ich die in diesem Kapitel gewonnenen Erkenntnisse in Abschnitt 5.5 noch einmal kurz zusammen.

## 5.2 Der Hamiltonoperator und seine Eigenschaften

### 5.2.1 Das Modell

In Abbildung 5.1 ist der Aufbau des Modellsystems gezeigt, das ich in diesem Kapitel untersuche: Zwei gleichartige 2NS mit der Übergangsenergie  $E_{\uparrow\downarrow}$  sind im Abstand  $L$  jeweils an den Orten  $x_A$  und  $x_B = x_A + L$  in einen *1D* Wellenleiter mit NNWW symmetrisch um das Zentrum des Wellenleiters eingebettet. Dort koppeln sie mit Stärke  $V$  an das elektromagnetische Feld des Wellenleiters. Der Hamiltonoperator dieses Systems lautet im Rahmen der RWA

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \sum_{x=x_1}^{x_N} \hbar\omega_0 \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_x + J \sum_{x=x_1}^{x_{N-1}} \left( \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_{x+\alpha} + \hat{a}_{x+\alpha}^\dagger \hat{a}_x \right) \\ & + \frac{E_{\uparrow\downarrow}}{2} \left( \hat{\sigma}_z^A + \hat{\sigma}_z^B \right) \\ & + V \sum_{l=A,B} \left( \hat{a}_{x_l} \hat{\sigma}_l^+ + \hat{\sigma}_l^- \hat{a}_{x_l}^\dagger \right). \end{aligned} \quad (5.1)$$

Die Gitterplatzenergie  $\hbar\omega_0$  und der Hüpfparameter  $J$  des Wellenleiters mit NNWW sind bereits aus Abschnitt 1.5.4 bekannt. Die Operatoren  $\hat{\sigma}_z^l$ ,  $\hat{\sigma}_l^+$  und  $\hat{\sigma}_l^-$  mit  $l \in \{A, B\}$  sind die Paulimatrizen der



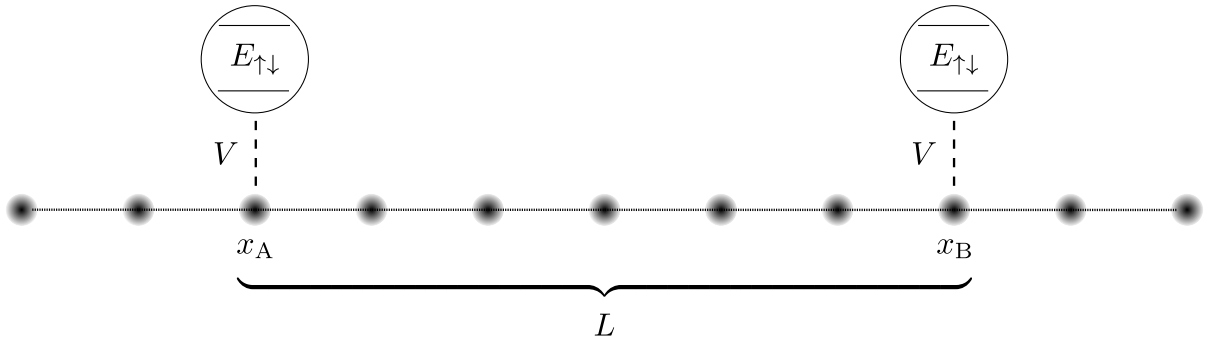


Abbildung 5.1: Skizze des in diesem Kapitel untersuchten Systems: Zwei gleichartige 2NS mit Übergangsenergie  $E_{\uparrow\downarrow}$  sind mit Kopplungsstärke  $V$  an zwei verschiedenen Orte  $x_A$  und  $x_B$  in einen Wellenleiter mit NNWW symmetrisch um das Wellenleiterzentrum eingebettet.

beiden 2NS und wurden in Abschnitt 1.4.5 definiert.

Die Eigenzustände der  $\hat{\sigma}_l$  seien  $|\uparrow_l\rangle$ , mit Eigenwert  $+1$  und  $|\downarrow_l\rangle$  mit Eigenwert  $-1$ . Diese Zustände bilden jeweils die atomare Basis der beiden 2NS, mit  $\{|\downarrow_l\rangle\}$  als die Grundzustände und  $\{|\uparrow_l\rangle\}$  als die angeregten Zustände. In dieser Basis lautet der Anregungszahloperator  $\hat{C}$  des durch den Hamiltonoperator  $\hat{H}$  aus Gleichung (5.1) beschriebenen Systems<sup>1</sup>

$$\hat{C} = \sum_{x=x_1}^{x_N} \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_x + \frac{1}{2} \left( \hat{\sigma}_z^A + \hat{\sigma}_z^B + 2\mathbb{1} \right). \quad (5.2)$$

Im Folgenden bezeichne ich die Besetzung des Zustandes  $|\uparrow_l\rangle$  als die *Anregung* oder *Besetzung* des Atoms  $l$ . Befindet sich das Atom vollständig in diesem Zustand, so bezeichne ich das Atom als *angeregt* beziehungsweise vollständig *besetzt*.

Ein allgemeiner Zustand  $|\Psi(t)\rangle$  des hier untersuchten Systems im Unterraum einer Anregung, dass heißt mit  $C = 1$ , lautet entsprechend Gleichung (2.37)

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{x=x_1}^{x_N} \phi^x(t) \hat{a}_x^\dagger |\mathbf{0}, \downarrow_A \downarrow_B\rangle + \phi_A(t) |\mathbf{0}, \uparrow_A \downarrow_B\rangle + \phi_B(t) |\mathbf{0}, \downarrow_A \uparrow_B\rangle. \quad (5.3)$$

Dieser Zustand ist für  $L = 0$  äquivalent zu dem Zustand eines ungetriebenen, entarteten V-Systems aus Gleichung (3.1) im Unterraum einer Anregung. Da im Falle des entarteten V-Systems dunkle Zustände aufgetreten sind, kann man diese auch für zwei entartete 2NS bei verschwindendem Abstand  $L$  erwarten.

### 5.2.2 Eigenspektrum und die Eigenzustände

Abbildung 5.2 zeigt numerisch berechnete Eigenspektren des Operators  $\hat{H}$  aus Gleichung (5.1) für Systeme mit  $J < 0$ ,  $V = |J|$  und für drei verschiedene Parametersätze  $\{E_{\uparrow\downarrow}, L\}$ . Anhand dieser Abbildung beschreibe ich im Folgenden die verschiedenen Klassen von Eigenzuständen, die ein durch den Hamiltonoperator  $\hat{H}$  beschriebenes System für  $C = 1$  aufweisen kann.

<sup>1</sup>Siehe auch Gleichung (1.67).

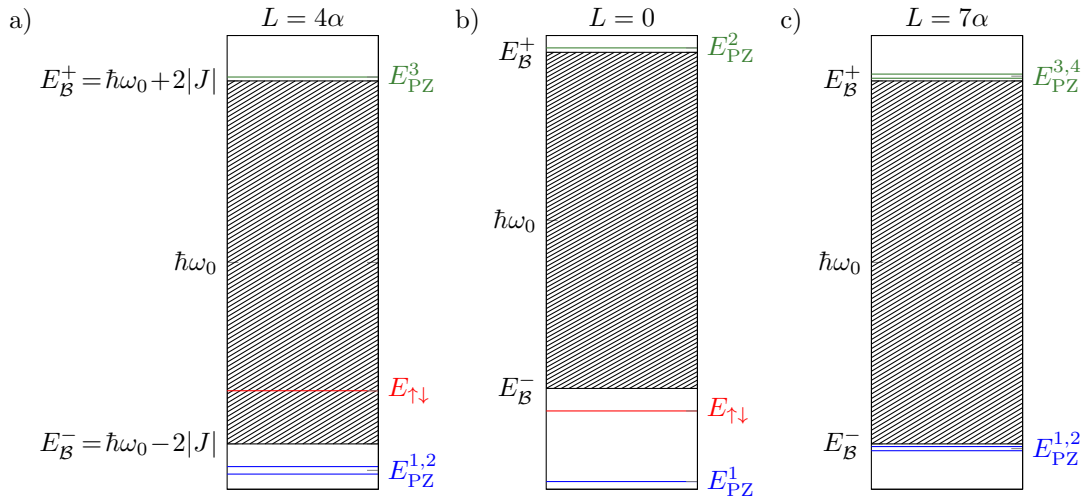


Abbildung 5.2: Drei Beispiele für Spektren des Hamiltonoperators aus Gleichung (5.1). Weitere Details sind dem Fließtext zu entnehmen.

### Streuzustände

Alle drei in Abbildung 5.2 gezeigten Konfigurationen weisen ein grau schraffiertes, um die Gitterplatzenergie  $\hbar\omega_0$  zentriertes Band mit Breite  $4|J|$  auf, das durch die Energien  $E_B^- = \hbar\omega_0 - 2|J|$  und  $E_B^+ = \hbar\omega_0 + 2|J|$  begrenzt wird. In diesem Bereich liegt ein Kontinuum von so genannten *Streuzuständen* (SZ) vor, welche alle durch Gleichung (5.1) beschriebenen Systeme für endliche Hüpfparameter  $J$  aufweisen. Die SZ sorgen für den Photontransport im System und entsprechen in großer Entfernung von den beiden 2NS ungedämpft propagierender Wellen photonischer Anregung. Die Energien  $E_{SZ}$  der SZ sind die der Eigenzustände des freien Wellenleiters, liegen also energetisch auf der Kurve  $\hbar\omega_k$ , mit der Dispersionsrelation des Wellenleiters

$$\omega_k = \omega_0 + 2|J|\hbar^{-1} \cos(k\alpha).$$

Dies ist unabhängig von der Art und der Lage des Streuers im Wellenleiter.

Nicht unabhängig von den weiteren Systemparametern ist die photonische Besetzung  $\langle \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_x \rangle_{SZ}$  der Wellenleitergitterplätze  $x$ , sowie die Besetzung der beiden 2NS in einem SZ. In Abbildung 5.3 ist für vier verschiedene SZ desselben Systems die photonische Besetzung eines Wellenleiters aus  $N = 10000$  Gitterplätzen gezeigt. Die 2NS sind zentriert um den Gitterplatz  $5000\alpha$  im Abstand von  $L = 103\alpha$  in den Wellenleiter eingebettet. Es ist für alle vier Fällen der Charakter propagierender Wellen der SZ in den Randbereichen des Wellenleiters ersichtlich.

### Kavitätszustände und dunkle Zustände

Wie schon in Abschnitt 3.1 erwähnt, wirkt ein 2NS auf ein energetisch resonantes Photon wie ein perfekter Spiegel [59–62] und reflektiert es vollständig. Zwei entartete 2NS im richtigen Abstand können dementsprechend im Wellenleiter wie eine Kavität wirken und sogenannte *Kavitätszustände* (CZ) unter den Eigenzuständen ausbilden. In einem solchen CZ bildet sich zwischen den Atomen im Wellenleiter

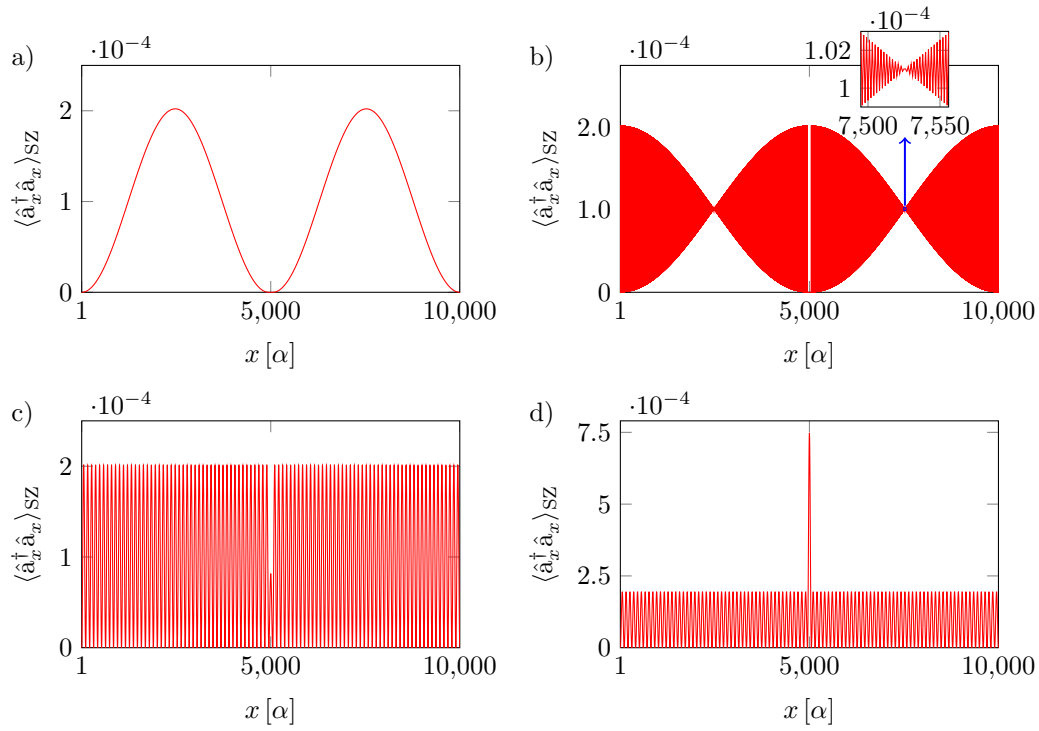


Abbildung 5.3: Vier Beispiele für die photonische Besetzung des Wellenleiters  $\langle \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_x \rangle_{SZ}$  in verschiedenen SZ. Die Systemparameter sind so gewählt, dass  $E_{\uparrow\downarrow}$  mitten im Wellenleiterband liegt und der Abstand der Atome  $L = 103\alpha$  beträgt. Abbildung a) zeigt die Besetzung der im Wellenleiterband äußeren beiden Streuzustände, also den mit der niedrigsten und den mit der größten Eigenenergie, während b) den Streuzustand zeigt, der mitten im Band liegt. Die Zustände in c) und d) liegen beide im äußeren Bandbereich. Weitere Details sind dem Fließtext zu entnehmen. Die übrigen Systemparameter sind  $J < 0$  und  $V = |J|$ .

eine stehende Welle photonischer Anregung aus, mit Wellenknoten an den Orten der Atome. Gleichzeitig ist die atomare Besetzung in diesen Zuständen endlich.

Der Abstand  $L_{CZ}$ , bei dem die CZ auftreten, lässt sich in zwei Schritten berechnen: Wie oben beschrieben muss die photonische Energie in einem CZ gleich der atomaren Übergangsenergie sein, woraus sich die Kreiswellenzahl  $k_{CZ}$  der stehenden Welle ergibt:

$$\hbar\omega_0 + 2J \cos(k_{CZ}\alpha) \stackrel{!}{=} E_{\uparrow\downarrow} \Rightarrow k_{CZ} = \alpha^{-1} \arccos\left(\frac{E_{\uparrow\downarrow} - \hbar\omega_0}{2J}\right). \quad (5.4)$$

Weiterhin gilt die Bedingung, dass sich im Abstand  $L_{CZ}$  Knoten der stehenden Welle befinden müssen, da die Photonische Anregung am Ort der Atome verschwinden soll. Eine stehende Welle kann durch eine Sinusfunktion beschrieben werden, die somit am Ort der Atome verschwinden muss:

$$\sin(k_{CZ}L_{CZ}) \stackrel{!}{=} 0 \stackrel{(5.4)}{\Rightarrow} L_{CZ} = \frac{n\pi\alpha}{\arccos\left(\frac{E_{\uparrow\downarrow} - \hbar\omega_0}{2J}\right)}, \quad \text{mit } n \in \mathbb{N}. \quad (5.5)$$

Das in Abbildung 5.2a) gezeigte Spektrum ist für die Parameter  $J < 0$  und  $E_{\uparrow\downarrow} - \hbar\omega_0 = -\sqrt{2}|J|$  berechnet worden. Setzt man diese Werte in Gleichung (5.5) ein, so ergibt sich  $L_{CZ} = 4n\alpha$ . Da das Spektrum außerdem für  $L = 4\alpha$  berechnet wurde, existiert im zugehörigen System ein CZ und ist in Abbildung 5.2a) rot markiert. Anhand dieser Darstellung wird eine besondere Eigenschaft der CZ deutlich: Sie liegen mitten im Kontinuum der SZ. Dies liegt daran, dass die Übergangsenergie der Atome  $E_{\uparrow\downarrow}$  und somit auch die Energie der CZ innerhalb eines Bandes des freien Wellenleiters liegen muss, damit sich zwischen den Atomen die stehende Welle ausbilden kann. Die Energien der SZ decken sich, wie oben beschrieben, mit den Energien der Eigenzustände des freien Wellenleiters. Somit liegen die CZ zwangsläufig energetisch mitten im Kontinuum der SZ. Ein CZ ist immer ein Eigenzustand des Systems und sein photonischer Anteil im Wellenleiter ist auf den Raum zwischen den Atomen begrenzt. Aus diesem Grund werden die CZ auch oft als *gebundene Zustände im Kontinuum* [100] bezeichnet.

In Abbildung 5.4 sind die photonischen Wellenleiterbesetzungen für ein System mit  $J < 0$  und  $E_{\uparrow\downarrow} - \hbar\omega_0 = -\sqrt{3}|J|$  in Abhängigkeit des Abstands  $L$  gezeigt, vorausgesetzt sie existieren bei gegebenem  $L$ . Bei den genannten Werten ist dies entsprechend Gleichung (5.5) für  $L_{CZ} = 6n\alpha$  der Fall.

Die Abbildung 5.2c) zeigt ein Spektrum, bei dem die atomare Übergangsenergie  $E_{\uparrow\downarrow}$  mitten im photonischen Band liegt. Die Abstandsbedingung für einen CZ ergibt sich in diesem Fall zu  $L_{CZ} = 2n\alpha$ . Da das Spektrum jedoch für den Abstand  $L = 7\alpha$  berechnet wurde, findet man hier keinen CZ.

In Abbildung 5.2b) liegt  $E_{\uparrow\downarrow}$  außerhalb des Wellenleiterbandes. Ein CZ kann hier also bei keinem Abstand  $L$  zwischen den Atomen auftreten. Allerdings wurde das Spektrum für ein System mit  $L = 0$  aufgenommen. Wie in Abschnitt 5.2.1 erwähnt, ist das System der zwei entarteten und in den Wellenleiter eingebetteten 2NS für  $L = 0$  im Unterraum einer Anregung äquivalent zu einem System mit einem in den Wellenleiter eingebetteten V-Atom. Somit ist der in diesem Spektrum rot markierte Eigenzustand ein dunkler Zustand, wie er auch beim V-Atom in diesem Fall auftritt und in dem keine photonische Besetzung im Wellenleiter vorliegt und die Besetzungsamplituden der Atome einen Phasenunterschied von  $\pi$  aufweisen. Dieser dunkle Zustand tritt im Falle der zwei 2NS für  $L = 0$  immer und unabhängig von den weiteren Parametern als Eigenzustand des Gesamtsystems mit der atomaren Übergangsenergie  $E_{\uparrow\downarrow}$  als Eigenenergie auf.

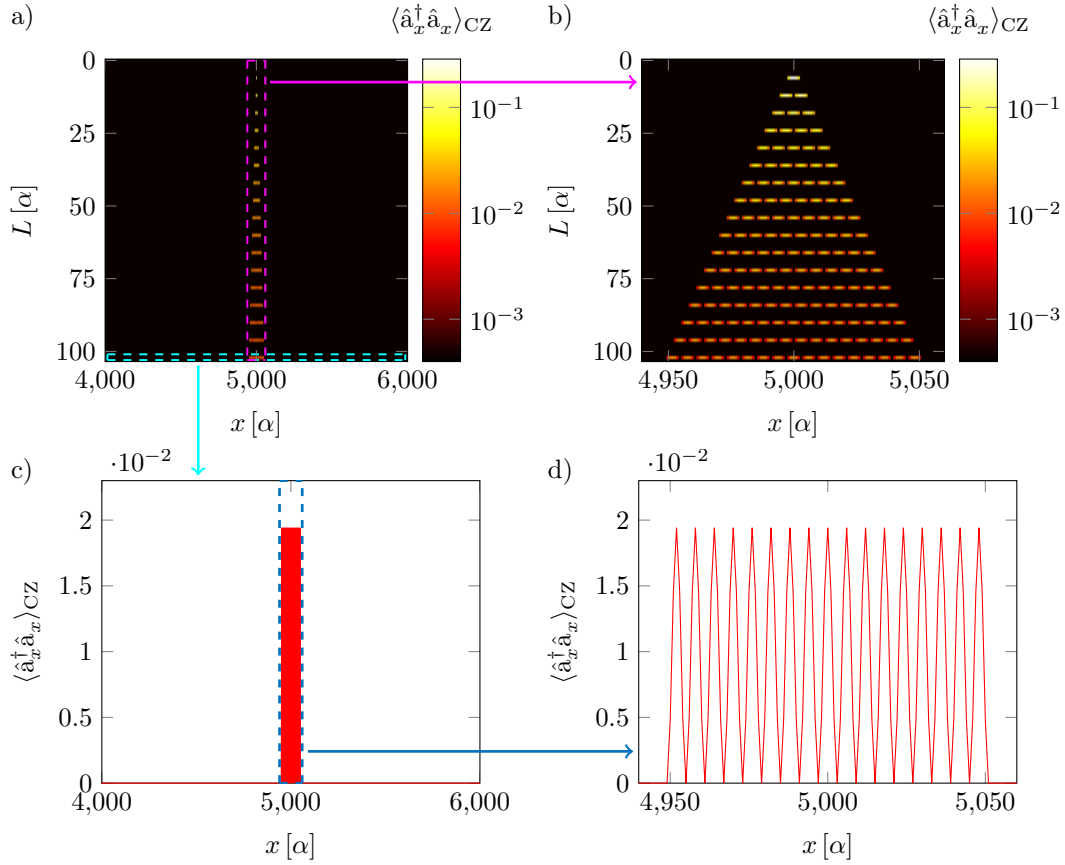


Abbildung 5.4: Beispiele für die Wellenleiterbesetzung  $\langle \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_x \rangle_{CZ}$  der CZ in einem System für die Abstände von  $L = 0$  bis  $L = 103\alpha$ . Die atomare Übergangsenergie ist  $E_{\uparrow\downarrow} = \hbar\omega_0 - \sqrt{3}|J|$ , so dass nur für Abstände mit  $L = 6n\alpha$  und  $n \in \{1, 2, 3, \dots\}$  CZ auftreten. In b), c) und d) sind jeweils detailliertere Ausschnitte von a) entsprechend der farblichen Rahmen und Pfeile gezeigt. Die weiteren Parameter sind  $J < 0$ ,  $V = |J|$  und der Wellenleiter wurde durch  $N = 10000$  Gitterplätze modelliert.

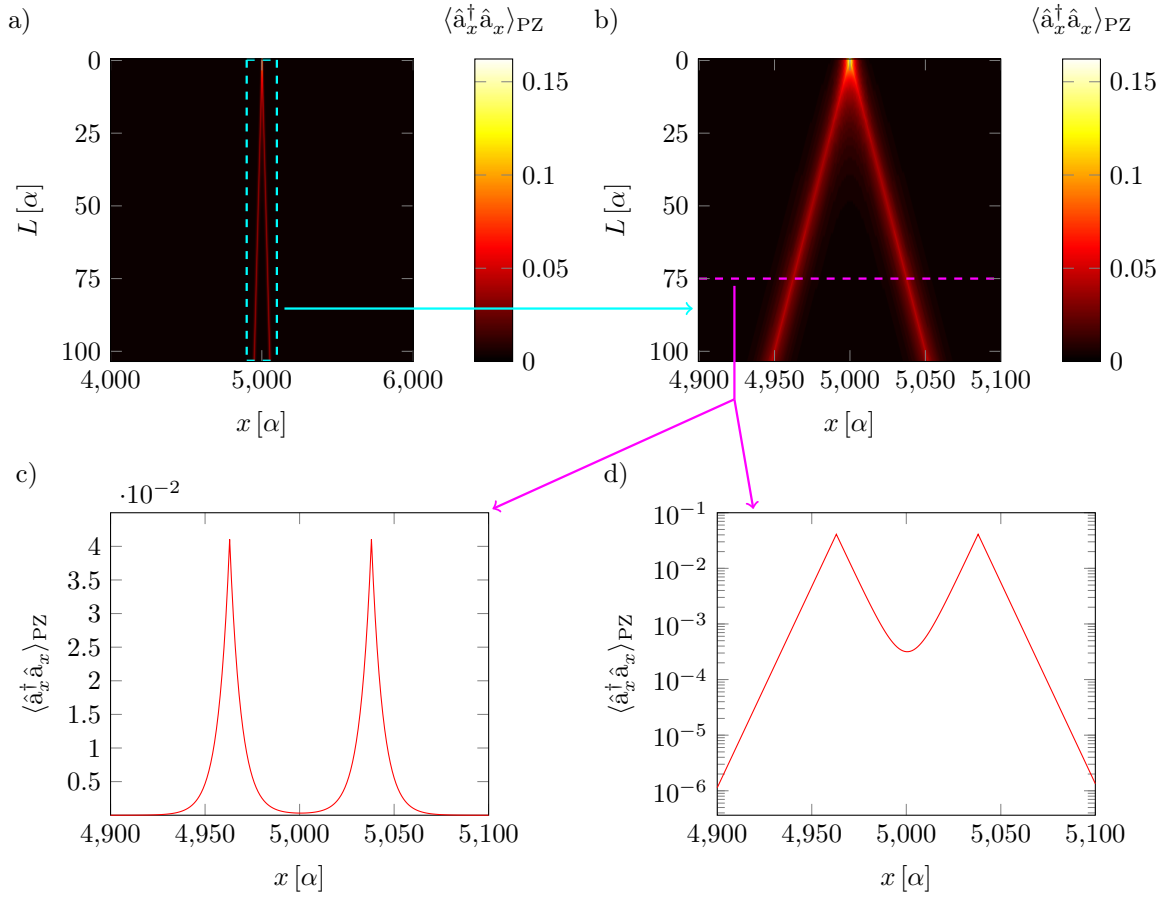


Abbildung 5.5: Beispiele für die Wellenleiterbesetzung  $\langle \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_x \rangle_{\text{PZ}}$  der PZ in einem System für die Abstände von  $L = 0$  bis  $L = 103\alpha$ . In b) und c) sind jeweils detaillierte Ausschnitte von a) entsprechend des farblichen Rahmens, des Strichs und der Pfeile gezeigt. Abbildung d) zeigt c) in semilogarithmischer Darstellung, so dass die evaneszente Natur der PZ deutlich wird. Die Systemparameter sind  $J < 0$ ,  $E_{\uparrow\downarrow} = \hbar\omega_0 - 4|J|$ ,  $V = |J|$ , der Wellenleiter wurde durch  $N = 10000$  Gitterplätze modelliert und es ist der jeweils höchstenergetische PZ gezeigt.

## Polaritonische Zustände

Die letzte Klasse von Eigenzuständen, die im hier betrachteten System auftreten, sind *polaritonische Zustände (PZ)*, deren Eigenenergien außerhalb des Wellenleiterbandes liegen. Die PZ weisen eine endliche Besetzung der beiden 2NS und eine um die Orte der der Atome exponentiell nach außen abfallende und somit stark lokalisierte photonische Besetzung des Wellenleiters auf, vergleiche Abbildung 5.5.

Die PZ treten bereits in Systemen auf, in denen nur ein Atom in den Wellenleiter eingebettet ist [66, 67, 101, 102]. Das Atom wechselwirkt mit den photonischen Moden an den Bandkanten des Wellenleiters, deren Gruppengeschwindigkeit verschwindet. Durch diese Wechselwirkung teilt sich ein atomares Niveau in zwei Zustände auf, die beide eine anormale Lamb-Verschiebung erfahren. Bei dieser Lamb-Verschiebung wird ein Zustand ins Wellenleiterband absorbiert, während der andere in der Bandlücke einen PZ ausbildet [101, 102]. Dabei ist die Existenz einer Bandkante in der Dispersionsrelation des Wellenleiters eine notwendige Bedingung für die Ausbildung eines PZ. In einem 1D System mit zwei Bandkanten und einem 2NS existieren immer zwei PZ.

Oft werden die PZ als *gebundene Atom-Photon-Zustände* bezeichnet [66, 67, 81, 101, 102]. Es wurde mit Hilfe numerischer Simulationen demonstriert, dass es möglich ist durch die gleichzeitige Streuung von zwei Photonen an einem 2NS die PZ des Systems anzuregen. Somit kann ein endlicher Anteil der photonischen Anregung durch das Atom eingefangen und in dessen Umgebung gebunden werden [66, 67, 81]. Dies ist bei der Einzelphotonstreuung nicht möglich, da die Energie des propagierenden und zu streuenden Photons im photonischen Band des Wellenleiters liegen muss. Daher können propagierende Photonen nur durch einen nichtlinearen Streuprozess einen PZ in einer Bandlücke anregen. Ein 2NS ist jedoch für ein einzelnes Photon ein linearer Streuer. Erst im Falle zwei propagierender Photonen lässt sich das Atom durch Absorption sättigen, wodurch es für das verbleibende Photon nichtlineare Streueigenschaften entwickelt, die somit die Anregung eines PZ in diesem Fall ermöglicht [66, 67].

Anhand der drei Spektren in Abbildung 5.2 sind die Energieniveaus der über dem Wellenleiterband liegenden PZ grün eingezeichnet und die der unter dem Band liegenden PZ blau eingezeichnet. Es ist ersichtlich, dass sich die Anzahl der vorhandenen PZ in den drei Systemen unterscheidet. So existieren im Spektrum in Abbildung 5.2b) zwei, in Abbildung 5.2a) drei und in Abbildung 5.2c) vier PZ. Die Anzahl der PZ, die sich unter beziehungsweise über dem Band ausbilden, ist vor allem vom Abstand  $L$  der beiden Atome abhängig: Für große Abstände sind über und unter dem Wellenleiterband jeweils immer zwei PZ vorhanden, die für  $L \rightarrow \infty$  paarweise entartet sind. Mit abnehmenden Abstand  $L$  wird die Entartung durch das Prinzip der vermiedenen Kreuzung (englisch: avoided crossing) aufgehoben, wobei jeweils einer der Zustände energetisch von Band weg- und einer zum Band hin verlagert wird. Ab einem kritischen Abstand  $L_k^\pm$ , mit „+/-“ für das Zustandspaar über/unter dem Band, wird der PZ mit zum Band verlagerter Eigenenergie von diesem Kontinuum „absorbiert“. Der entsprechende PZ wird dabei ein SZ. Bei  $L = 0$  sind über und unter dem Band des Wellenleiters in jedem Fall nur noch je ein PZ zu finden.

In Referenz [99], in der das in diesem Kapitel untersuchte System analytisch mittels quantenfeldtheoretischer Methoden analysiert wird, ist ein Ausdruck für die kritischen Abstände  $L_k^\pm$  angegeben:

$$L_k^\pm = \frac{2\alpha|J|\left(2|J| \mp \left(E_{\uparrow\downarrow} - \hbar\omega_0\right)\right)}{V^2}. \quad (5.6)$$

In Abbildung 5.6 sind die numerisch ermittelten Eigenenergien  $E_{PZ}$  der PZ für ein System mit  $J < 0$ ,

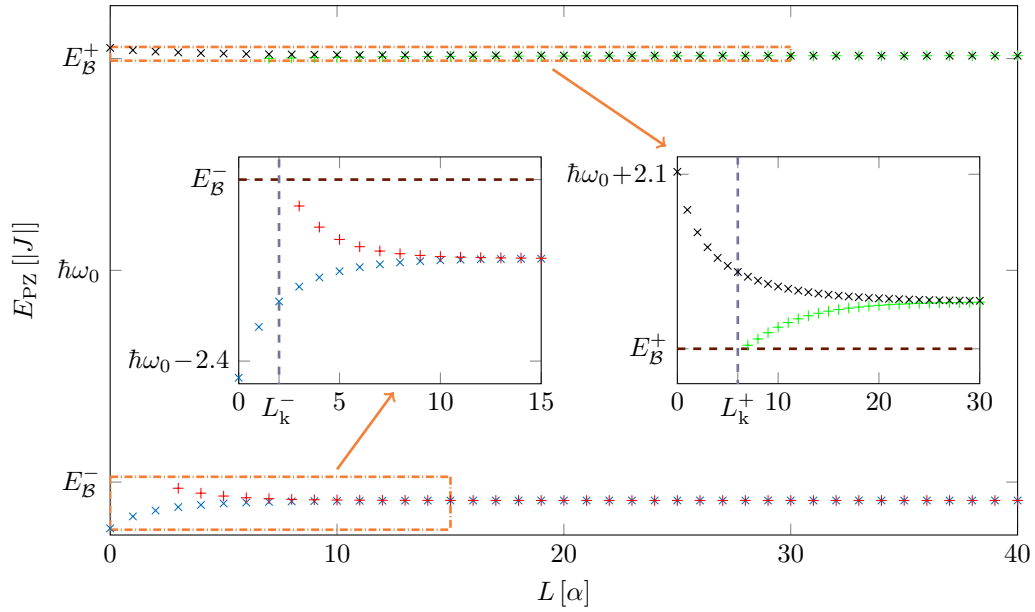


Abbildung 5.6: Die Eigenenergien der PZ über dem atomaren Abstand  $L$ . Weitere Details sind dem Fließtext zu entnehmen. Der Wellenleiter wurde in diesem Beispiel durch  $N = 10000$  Gitterplätze modelliert.

$E_{\uparrow\downarrow} - \hbar\omega_0 = -|J|$  und  $V = |J|$  über dem Abstand  $L$  der beiden Atome aufgetragen. Es ist in dieser Abbildung gut ersichtlich, wie das System entsprechend Gleichung (5.6) erst ab  $L = L_k^\pm + \alpha$  jeweils einen weiteren PZ ausbildet.

### 5.3 Emissionsdynamik bei einem angeregten Atom

In diesem Abschnitt untersuche ich die zeitliche Entwicklung der atomaren Besetzungen  $\langle |\uparrow_A\rangle\langle\uparrow_A|(t) \rangle$  und  $\langle |\uparrow_B\rangle\langle\uparrow_B|(t) \rangle$  für den Fall, dass zunächst eines der beiden Atome vollständig angeregt ist und der Wellenleiter und das zweite Atom zunächst keine Anregung aufweisen. Dabei interessiere ich mich insbesondere dafür, wie sich die verschiedenen Arten von Eigenzuständen des Systems auf die Dynamik auswirken.

Das zunächst angeregte Atom sei, ohne Beschränkung der Allgemeinheit, das Atom am Ort  $x_A$ . Der Anfangszustand  $|\Psi(t_0)\rangle$  lautet somit in diesem Fall

$$|\Psi(t_0)\rangle = |0, \uparrow_A \downarrow_B\rangle. \quad (5.7)$$

Wie schon in Abschnitt 4.3.3 beschrieben, ist die atomare Emissionszeit

$$\tau(k_0) = \frac{\hbar^2 |v_g(k_0)|}{2\alpha V^2} \Rightarrow \tau(k_0) \propto \frac{|J|}{V^2}, \quad (5.8)$$

ein wichtiger Parameter bei der Beschreibung von Absorptions- und Emissionsprozessen. Je kleiner  $\tau(k_0)$ , desto schneller verläuft ein Emissionsprozess. Das hat zur Folge, dass emittierte Einzelphoton-



wellenpakete räumlich schmaler sind, als im Falle größerer  $\tau(k_0)$ . Somit ist das bei großem  $\tau(k_0)$  emittierte Photon spektral schmaler als im Falle kleinerer  $\tau(k_0)$ . Es ist daher zu erwarten, dass die vom Atom emittierte Strahlung bei kleinerem  $\tau(k_0)$  stärker die nichtlineare Struktur der Verteilung der Eigenenergien im Spektrum beziehungsweise der Dispersionsrelation des Systems erfährt, als bei größerem  $\tau(k_0)$ . Dementsprechend sollten bezüglich der Emissionsdynamik im Falle eines kleinen  $\tau(k_0)$  bei im Wellenleiterband liegender, atomarer Übergangsenergie  $E_{\uparrow\downarrow}$  die außerhalb des Bandes liegenden PZ einen größeren Einfluss auf die Dynamik haben und das Photon außerdem größerer Dispersion bei der Propagation unterliegen, als bei größerem  $\tau(k_0)$ .

Entsprechend Gleichung (5.8) ist  $\tau(k_0)$  proportional zum Verhältnis des Betrages des Hüpffparameters  $J$  zum Quadrat der Kopplungsstärke  $V$ . Ich habe daher bei meinen Studien in diesem Abschnitt zwischen zwei Fällen unterschieden: Der Erste ist derjenige *schwacher Kopplung*, mit  $|J|/V^2 = 100/|J|$ , der andere ist der Fall *starker Kopplung* mit  $|J|/V^2 = 1/|J|$ . Diese beiden Begriffe werden in der Kavitätsquantenelektrodynamik (englisch cavity quantum electrodynamics) verwendet, wobei schwache Kopplung dort dem Fall entspricht, dass die Kopplungsstärke eines 2NS an eine optische Kavität viel kleiner ist, als die irreversible Zerfallsrate der Kavität in experimentell unkontrollierbare Verlustkanäle [103]. In Abschnitt 3.2.2 habe ich gezeigt, dass die Betrachtung des Wellenleiters als Verlustkanal einer Kavität am Ort eines Atoms qualitativ die im System auftretenden Effekte erhält. Da die Kopplung der Wellenleitergitterplätze untereinander durch  $J$  gegeben ist, ist die Entlehnung der Begriffe *starker* und *schwacher* Kopplung aus der Kavitätsquantenelektrodynamik an dieser Stelle gerechtfertigt.

### 5.3.1 Schwache Kopplung

In Abbildung 5.7 ist die zeitliche Entwicklung der Besetzungen der beiden 2NS für den Fall schwacher Kopplung in Abhängigkeit des Abstands  $L$  für drei verschiedene atomare Übergangsenergien gezeigt. In den Abbildungen 5.7a) und b) liegt  $E_{\uparrow\downarrow}$  in der Mitte des Wellenleiterbandes. Es ist zu erkennen, dass das zunächst angeregte Atom beginnt in den Wellenleiter zu emittieren und das zweite, sich zunächst in seinem Grundzustand befindende Atom dadurch angeregt wird und dann ebenfalls die absorbierte Strahlung wieder reemittiert. Allerdings führt dies nur im Falle ungeradzahliger Abstände  $L$  dazu, dass die Atome ihre Anregung vollständig in den Wellenleiter emittieren. Im Falle geradzahliger Abstände  $L$  verbleibt in beiden Atomen auch für große Zeiten eine endliche, konstante Anregung. Diese ist in beiden Atomen gleich und im Falle  $L = 0$  am größten mit

$$\langle |\uparrow_A\rangle \langle \uparrow_A | (t_{\max}) \rangle = \langle |\uparrow_B\rangle \langle \uparrow_B | (t_{\max}) \rangle = 0.25.$$

Für den Abstand  $L = 50\alpha$  beträgt die Anregung in den beiden Atomen noch etwa 80% dieses Wertes.

In den Abbildungen 5.7c) und d) liegt  $E_{\uparrow\downarrow}$  im Band und ist um  $\sqrt{2}|J|$  von der Bandmitte nach unten verschoben. Hier zeigt sich qualitativ das gleiche Verhalten wie im Fall  $E_{\uparrow\downarrow} = \hbar\omega_0$ , mit dem Unterschied, dass hier nur bei Abständen mit  $L = 4n\alpha$  mit  $n \in \{0, 1, 2, \dots\}$  das Langzeitbesetzungsverhalten auftritt. Für diese Langzeitbesetzung sind in beiden Fällen die CZ verantwortlich, die nach Gleichung (5.5) im Falle von  $E_{\uparrow\downarrow} = \hbar\omega_0$  nur für geradzahlige Abstände  $L$  und im Falle von  $E_{\uparrow\downarrow} - \hbar\omega_0 = -\sqrt{2}|J|$  nur für ganzzahlig viertelbare Abstände  $L$  auftreten. Wenn also ein System so konfiguriert ist, dass unter seinen Eigenzuständen auch ein CZ existiert, so wird dieser bei der Emission eines Atoms in den unbesetzten Wellenleiter im Falle schwacher Kopplung angeregt, so dass im Grenzfall langer Zeiten beide Atome eine endliche Anregung aufweisen. Diese nimmt mit größerem Abstand  $L$  ab, da in diesem Fall der Anteil der photonischen Besetzung des Wellenleiters zwischen den Atomen

## 5 Dynamik der Photonemission zweier Zweiniveausysteme in einem eindimensionalen Wellenleiter

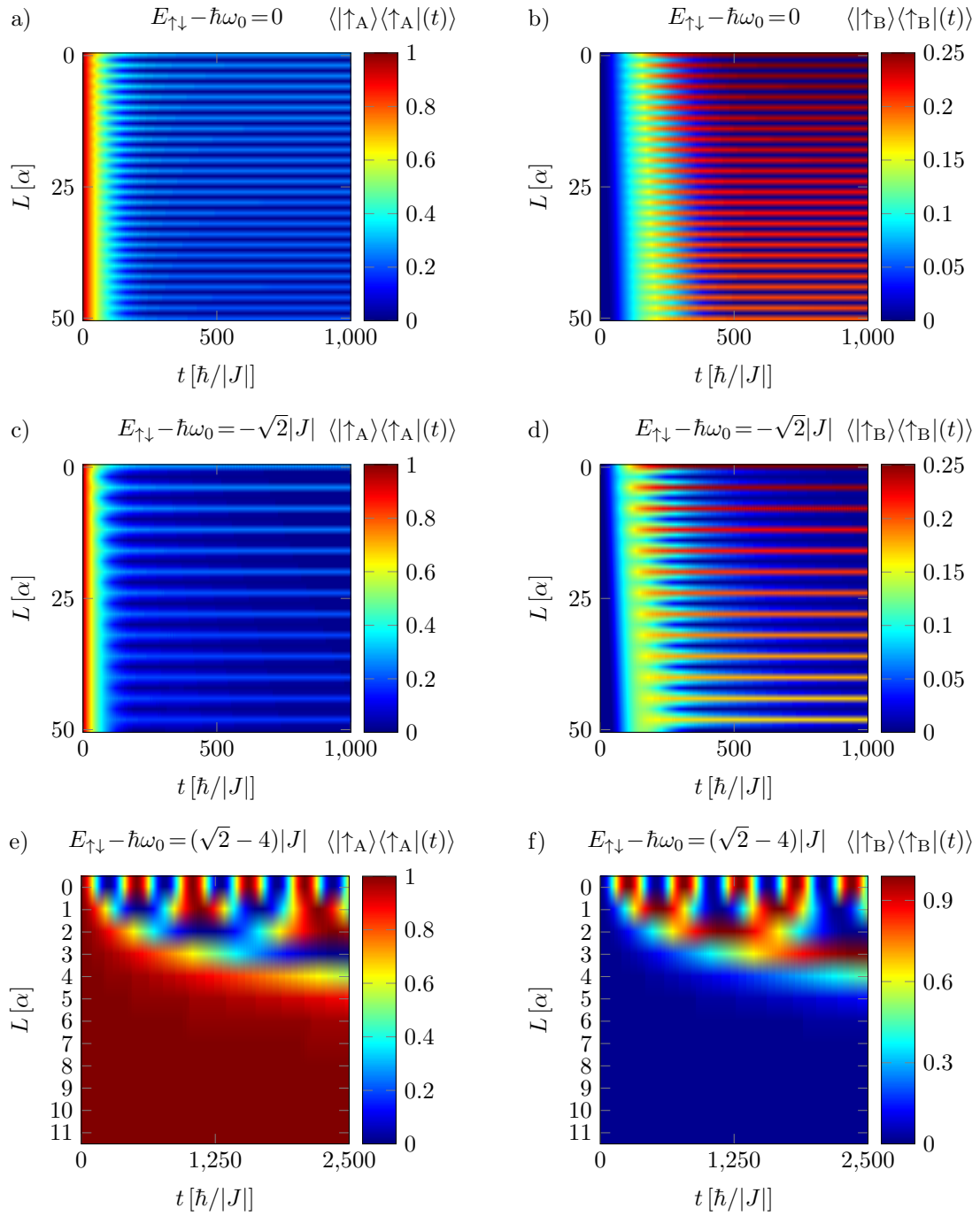


Abbildung 5.7: Anregung der Atome  $\langle |\uparrow_l \rangle \langle \uparrow_l | (t) \rangle$  mit  $l \in \{A, B\}$  über der Simulationszeit  $t$  und dem Abstand der Atome  $L$  für den Fall schwacher Kopplung und das zunächst nur das Atom am Ort  $x_A$  angeregt ist. Weitere Details sind dem Fließtext zu entnehmen. Die übrigen Simulationsparameter sind  $J < 0$  und der Wellenleiter wurde durch  $N = 10000$  Gitterplätze modelliert.

in einem CZ zu Lasten des Anteil der atomaren Anregung größer ist. Im Falle  $L = 0$  sind nicht die CZ, sondern die dunklen Zustände für die Langzeitbesetzung der Atome verantwortlich.

Dass in diesen Fällen die Existenz von PZ unter den Eigenzuständen des Systems auf die Emissionsdynamik keinen Einfluss hat, wird durch die Abbildungen 5.8 und 5.9 deutlich. Diese zeigen die Ergebnisse numerischer Studien, die folgendermaßen durchgeführt worden sind:

Ich habe numerisch die Eigenzustände des Hamiltonoperators aus Gleichung (5.1) im Unterraum einer Anregung bestimmt. Diese Eigenzustände habe ich auf den Anfangszustand aus Gleichung (5.7) projiziert, um die Besetzungsamplituden  $\langle E|\Psi(0)\rangle$  der Eigenzustände  $|E\rangle$  im Anfangszustand zu gewinnen. Mit diesen habe ich zwei neue Anfangszustände konstruiert:

$$|\Psi(0)\rangle_{\text{PZ}} = \sum_{|E\rangle \in \{|E_{\text{PZ}}\}} \langle E|\Psi(0)\rangle |E\rangle, \quad (5.9a)$$

$$|\Psi(0)\rangle_{\text{SZ+CZ}} = |\Psi(0)\rangle - |\Psi(0)\rangle_{\text{PZ}} = \sum_{|E\rangle \in \{|E_{\text{PZ}}\}}^C \langle E|\Psi(0)\rangle |E\rangle. \quad (5.9b)$$

Hierin bezeichnet  $\{|E_{\text{PZ}}\}$  die Menge aller PZ unter den Eigenzuständen eines Systems und  $\{|E_{\text{PZ}}\}^C$  die entsprechende Komplementärmenge<sup>2</sup>. Der Zustand  $|\Psi(0)\rangle_{\text{PZ}}$  enthält einzig den Anteil der PZ im Anfangszustand  $|\Psi(0)\rangle$ , während der Zustand  $|\Psi(0)\rangle_{\text{SZ+CZ}}$  einzig den Anteil der SZ und CZ im Anfangszustand  $|\Psi(0)\rangle$  enthält. Die Zustände  $|\Psi(0)\rangle_{\text{PZ}}$  und  $|\Psi(0)\rangle_{\text{SZ+CZ}}$  habe ich analog zum Zustand  $|\Psi(0)\rangle$  numerisch in der Zeit entwickelt. Die Ergebnisse dieser Simulationen sind in Abbildung 5.8 für den Zustand  $|\Psi(0)\rangle_{\text{PZ}}$  und in Abbildung 5.9 für den Zustand  $|\Psi(0)\rangle_{\text{SZ+CZ}}$  gezeigt. Dabei war es technisch bedingt nötig, die beiden Anfangszustände zu Beginn der Simulation zu normieren. Aus diesem Grund sind die absoluten Zahlenwerte in den Abbildungen nur zwischen Zahlenwerten aus diesen beiden Abbildungen, nicht aber mit denen aus Abbildung 5.7 vergleichbar.

Es ist aus den Abbildungen 5.8a) bis d) und 5.9a) bis d) ersichtlich, dass der Beitrag der PZ bei schwacher Kopplung und für den Fall, dass  $E_{\uparrow\downarrow}$  im Wellenleiterband liegt, um drei bis vier Größenordnungen kleiner ist, als der Beitrag der übrigen Eigenzustände. Die PZ sind daher in diesem Fall vernachlässigbar.

In den Abbildungen 5.7e) und f) ist der zeitliche Verlauf der atomaren Besetzungen für den Fall  $E_{\uparrow\downarrow} - \hbar\omega_0 = (\sqrt{2} - 4)|J|$  gezeigt. Die atomare Übergangsenergie  $E_{\uparrow\downarrow}$  liegt hier also unterhalb des Wellenleiterbandes. In diesem Fall ist die zeitliche Entwicklung der atomaren Besetzungen laut den Abbildungen eine völlig andere, als für den Fall, dass  $E_{\uparrow\downarrow}$  im Band liegt. Bei  $L = 0$  oszillieren die atomaren Besetzungen gegenphasig mit einer Frequenz, die etwas kleiner ist als  $|J|/(500\hbar)$ . Bis zum Abstand  $L = 7\alpha$  setzen ebenso gegenphasige Oszillationen der atomaren Besetzungswerte ein, deren Frequenz mit wachsendem Abstand jedoch stark abnimmt. Ab einem Abstand von  $L > 7\alpha$  lassen sich keine derartigen Oszillationen mehr beobachten. Der Zustand  $|\uparrow_A\rangle$  bleibt in diesem Fall für alle Zeiten  $t$  vollständig angeregt, während das andere Atom vollständig in seinem Grundzustand  $|\downarrow_B\rangle$  verbleibt.

Den Abbildungen 5.8e) und f), sowie den Abbildungen 5.9e) und f) lässt sich entnehmen, dass in diesem Fall die Zeitentwicklung der atomaren Besetzungswerte hauptsächlich durch die PZ beeinflusst wird, während diesmal der Beitrag der übrigen Eigenzustände zu vernachlässigen und im Vergleich zum Beitrag der PZ um mindestens zwei Größenordnungen kleiner ist. Dieses Ergebnis ist folgendermaßen nachvollziehbar:

<sup>2</sup>Es gilt somit für die Menge aller Eigenzustände  $\{|E\rangle\} = \{|E_{\text{PZ}}\} \cup \{|E_{\text{PZ}}\}^C$ .

## 5 Dynamik der Photonemission zweier Zweiniveausysteme in einem eindimensionalen Wellenleiter

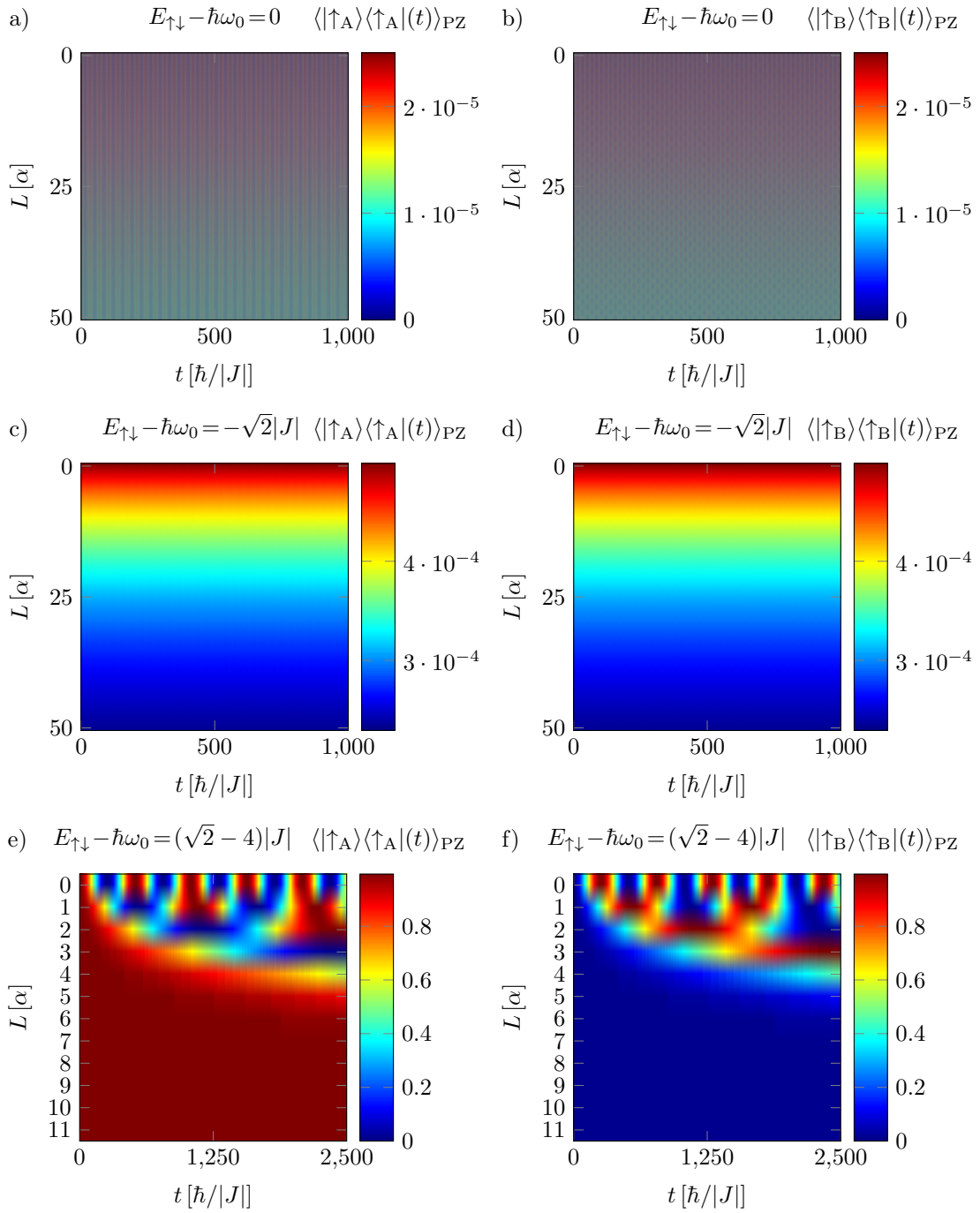


Abbildung 5.8: Anregung der Atome  $\langle |\uparrow_l\rangle\langle\uparrow_l|(t) \rangle$  mit  $l \in \{A, B\}$  über der Simulationszeit  $t$  und dem Abstand der Atome  $L$  für den Fall schwacher Kopplung und für den Anfangszustand  $|\Psi(0)\rangle_{\text{PZ}}$ , in dem nur PZ angeregt sind. Weitere Details sind dem Fließtext zu entnehmen. Die übrigen Simulationsparameter sind  $J < 0$  und der Wellenleiter wurde durch  $N = 10000$  Gitterplätze modelliert.

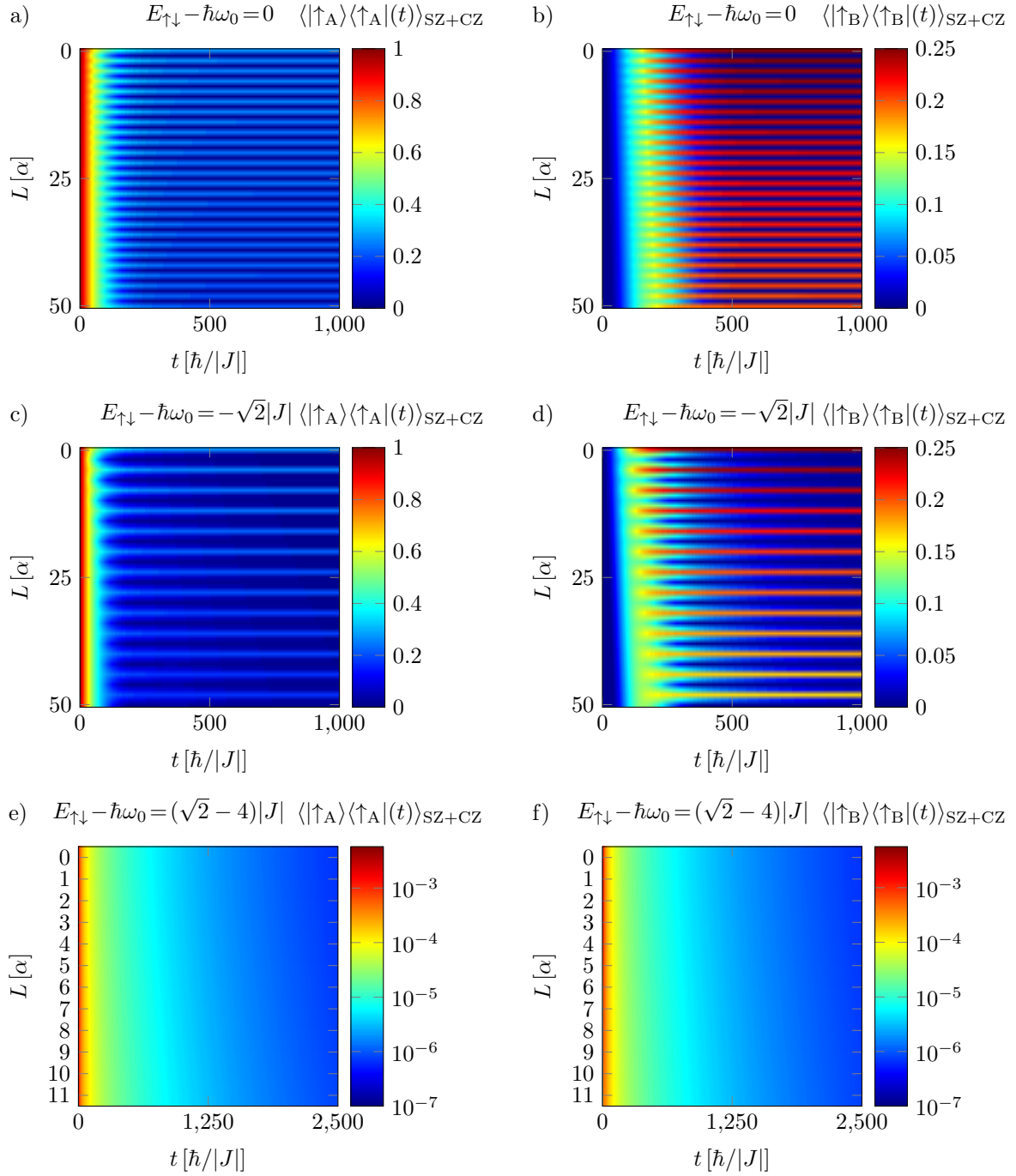


Abbildung 5.9: Anregung der Atome  $\langle |\uparrow_l\rangle\langle\uparrow_l|(t) \rangle$  mit  $l \in \{A, B\}$  über der Simulationszeit  $t$  und dem Abstand der Atome  $L$  für den Fall schwacher Kopplung und für den Anfangszustand  $|\Psi(0)\rangle_{CZ}$ , in dem nur CZ angeregt ist. Weitere Details sind dem Fließtext zu entnehmen. Die übrigen Simulationsparameter sind  $J < 0$  und der Wellenleiter wurde durch  $N = 10000$  Gitterplätze modelliert.

Liegt  $E_{\uparrow\downarrow}$  außerhalb des Bandes, kann das vom angeregten Atom in den Wellenleiter emittierte Licht dort nicht propagieren und wird exponentiell gedämpft. Gleichzeitig reabsorbiert und reemittiert dieses Atom die somit in seiner Umgebung lokalisierte Strahlung kontinuierlich. Ist der Abstand  $L$  zwischen den Atomen deutlich größer, als die Lokalisierungslänge<sup>3</sup>  $\xi$  der um den Ort des zunächst angeregten Atoms lokalisierten photonischen Anregungsamplituden, stellt sich letztendlich ein Gleichgewicht zwischen diesen Emissions- und Absorptionsprozessen ein. Das Atom ist in diesem Gleichgewichtszustand zu einem konstanten Anteil angeregt, der umso größer ist, je mehr Zeit das Atom für Emissions- und Absorptionsprozesse benötigt. Damit ist die Anregung des Atoms größer, je länger die Zeit  $\tau(k_0)$ , also je schwächer die Kopplung ist. Dies beschreibt exakt die Charakteristik eines PZ.

Im vorliegenden Fall gilt für die numerisch ermittelten Lokalisierungslängen der angeregten PZ  $\xi \approx 1.3\alpha$ . Dies erklärt, warum das zweite, zunächst nicht angeregte Atom für  $L > 7\alpha \gg \xi$  niemals angeregt wird. Gleichzeitig lässt sich durch die kurze Lokalisierungslänge und damit hohe Lokalisierung erklären, warum das zunächst angeregte Atom für diese Abstände vollständig angeregt bleibt: Bei dieser hohen Lokalisierung in Verbindung mit der schwachen Kopplung an den Wellenleiter wird der Großteil der im PZ vorhandenen Anregung durch den atomaren Anteil beigetragen.

Gilt  $L \lesssim \xi$ , so besteht für das in den Wellenleiter durch das zunächst angeregte Atom emittierte, exponentiell um den Ort  $x_A$  gedämpfte Photon die Möglichkeit zum Ort  $x_B$  des zunächst nicht angeregten Atoms zu tunneln und dieses anzuregen. Dieses Atom reemittiert das Photon in eine um den Ort  $x_B$  ebenfalls exponentiell abfallende „Mode“, in der das Photon zurück zum Atom am Ort  $x_A$  tunneln kann, um dort das ursprünglich angeregte Atom erneut anzuregen. So entwickelt sich ein Kreislauf, der zu den Oszillationen führt, die in den Abbildungen 5.7e) und f) zu beobachten sind. Mit größerem Abstand  $L$  wird die Tunnelwahrscheinlichkeit des Photons zwischen den Orten  $x_A$  und  $x_B$  kleiner, da der Überlapp des um den Ort eines Atoms lokalisierten Photons mit dem Ort des anderen Atoms entsprechen exponentiell mit dem Abstand  $L$  abnimmt. Da bei kleinerer Tunnelwahrscheinlichkeit der Zeitraum, nachdem das Photon mit hoher Wahrscheinlichkeit zum Ort des anderen Atoms getunnelt ist und absorbiert wurde, zunimmt, nimmt die Oszillationsfrequenz des oben beschriebenen Kreislaufs mit wachsendem  $L$  ab. Für  $L > 7\alpha$  sind die Oszillationen verschwunden und das andere, oben beschriebene Abstandsregime  $L \gg \xi$  ist erreicht.

### 5.3.2 Starke Kopplung

Abbildung 5.10 zeigt die Besetzungen der beiden Atome für starke Kopplung, unter sonst gleichen Bedingungen, wie im Fall von Abbildung 5.7. Die Abbildungen 5.11 und 5.12 zeigen entsprechend analog zu den Abbildungen 5.8 und 5.9 die zeitliche Entwicklung der Zustände  $|\Psi(0)\rangle_{PZ}$  und  $|\Psi(0)\rangle_{SZ+CZ}$  für starke Kopplung.

Den Abbildungen lässt sich entnehmen, dass der Beitrag der PZ zur Emissionsdynamik im Falle starker Kopplung bereits für den Fall, dass  $E_{\uparrow\downarrow}$  im Wellenleiterband liegt, im Vergleich zum Fall schwacher Kopplung signifikant ist. Die Erwartung, dass bei starker Kopplung und somit kürzerem  $\tau(k_0)$  aufgrund der größeren Bandbreite des emittierten Lichts die außerhalb des Bandes liegenden PZ die Emissionsdynamik stärker dominieren, als im Fall schwacher Kopplung, ist somit erfüllt.

Wie man den Abbildungen 5.11a) bis b) und 5.12a) bis b) im Vergleich mit den Abbildungen 5.10a) bis b) entnehmen kann, dominiert im Falle von  $E_{\uparrow\downarrow} = \hbar\omega_0$  jedoch weiterhin der Beitrag der SZ und der

<sup>3</sup>Wird ein räumlich exponentieller Zerfall beschrieben durch  $\exp(-\kappa|x|)$ , so ist die Lokalisierungslänge definiert durch  $\xi = \kappa^{-1}$ .

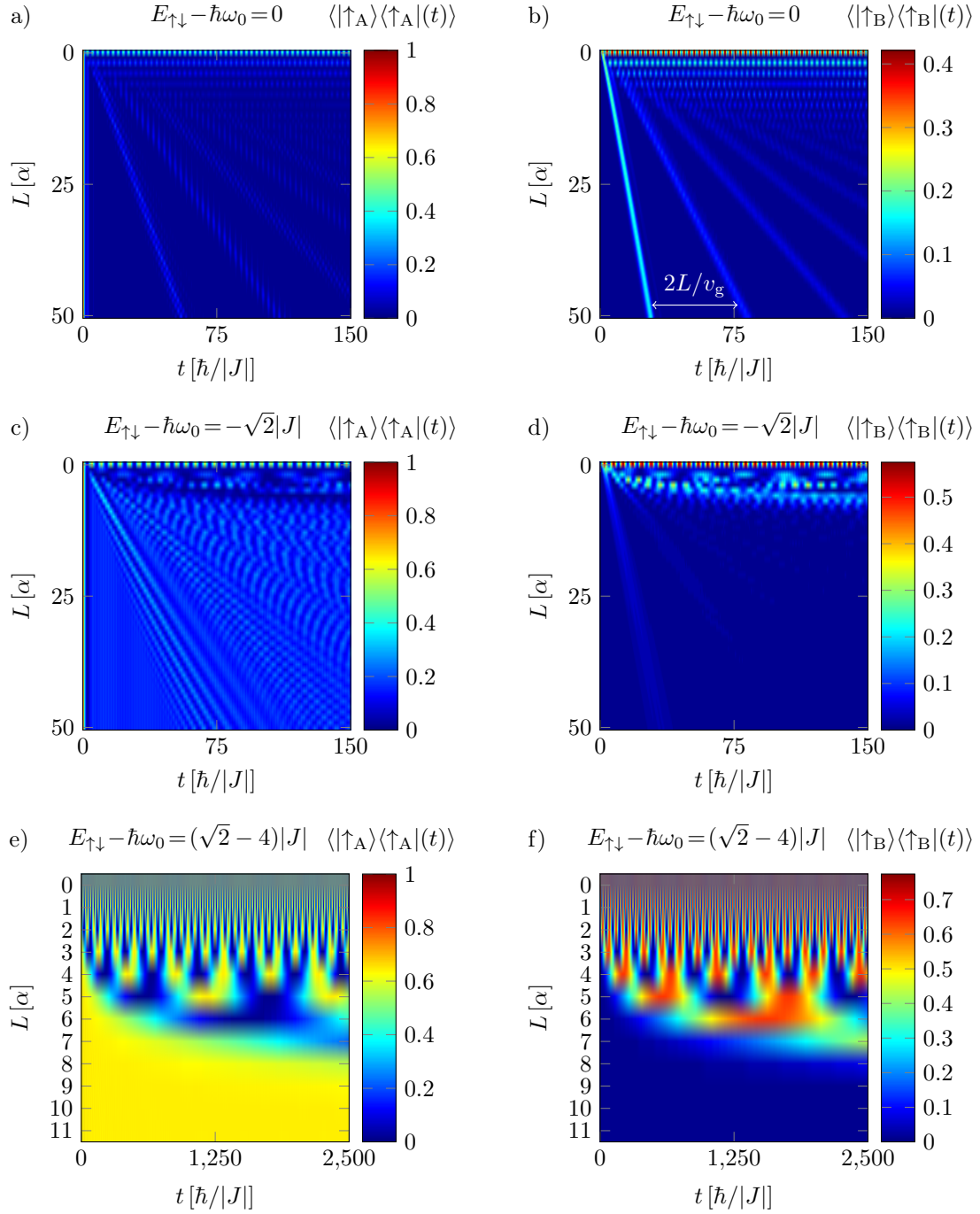


Abbildung 5.10: Anregung der Atome  $\langle |\uparrow_l\rangle \langle \uparrow_l| (t) \rangle$  mit  $l \in \{A, B\}$  über der Simulationszeit  $t$  und dem Abstand der Atome  $L$  für den Fall starker Kopplung und das zunächst nur das Atom am Ort  $x_A$  angeregt ist. Weitere Details sind dem Fließtext zu entnehmen. Die übrigen Simulationsparameter sind  $J < 0$  und der Wellenleiter wurde durch  $N = 10000$  Gitterplätze modelliert.

CZ die Emissionsdynamik. Die PZ modulieren auf die zeitliche Entwicklung der atomaren Besetzung hochfrequente Oszillationen mit niedriger Amplitude, die zeitlich globale Entwicklung wird durch den Einfluss der SZ und CZ bestimmt. Diese unterscheidet sich trotzdem stark von der Emissionsdynamik im Fall schwacher Kopplung. Im Fall starker Kopplung manifestiert sich keine Langzeitbesetzung der Atome für die Fälle, in denen CZ unter den Eigenzuständen des Systems zu finden sind. Für Abstände  $L > 19\alpha$  ist den Abbildungen kein Einfluss der CZ auf die Dynamik zu entnehmen. Bei kleineren Abständen oszillieren die atomaren Besetzungswerte für Abstände, bei denen ein CZ existiert, hochfrequent und ungedämpft. Für die Abstände in den Fällen, in denen keine CZ im Eigenspektrum existieren, verschwinden die atomaren Besetzungswerte im Grenzfall langer Simulationszeiten  $t$ .

Der geringe Einfluss der CZ im Falle starker Kopplung lässt sich folgendermaßen erklären: Je stärker die Kopplung  $V$ , desto kürzer ist  $\tau(k_0)$ . Stellt man sich den CZ als ein Zustand vor, in dem die Atome kontinuierlich die zwischen ihnen eingefangene Strahlung absorbieren und reemittieren, so dass sich, wie für die PZ oben beschrieben, der CZ als Gleichgewichtszustand einstellt, so wird die atomare Besetzung im CZ kleiner sein, je stärker die Kopplung ist. Dementsprechend haben die CZ bei starker Kopplung weniger Überlapp mit dem Anfangszustand aus Gleichung (5.7) und haben somit auch deutlich weniger Einfluss auf die zeitliche Entwicklung dieses Zustands. Wenn außerdem bei starker Kopplung die räumliche Ausdehnung jedes der beiden vom angeregten Atom isotrop emittierten Wellenpakete viel kleiner ist, als der Abstand  $L$ , ist bildlich gesprochen die „Reichweite“ des Photons zu kurz, um auf der Distanz  $L$  einen CZ auszubilden. Stattdessen setzen sich diese Wellenpakete nur aus SZ zusammen. Da jedes dieser beiden Wellenpakete spektral um die Übergangsenergie  $E_{\uparrow\downarrow}$  zentriert ist, wird das Wellenpaket, das in Richtung des zweiten Atoms emittiert wird, von diesem hauptsächlich reflektiert und propagiert zurück zum ersten Atom und wird auch von diesem fast vollständig reflektiert. So propagiert dieses Wellenpaket immer wieder zwischen den Atomen hin und her und wird dabei allerdings bei jeder Reflexion an Intensität verlieren, da die Atome das Paket aufgrund seiner spektralen Breite niemals vollständig reflektieren. Dieses Verhalten führt zu den strahlenartig anmutenden Besetzungsmaxima in den Abbildungen 5.10a) und b). Diese Strahlen haben einen zeitlichen Abstand von  $2L/[v_g(\pi/(2\alpha))]$ , was genau der Zeit entspricht, die ein Einzelphotonwellenpaket, dessen Energie spektral um  $\hbar\omega_0$  verteilt ist, benötigt, um zwei mal die Strecke zwischen beiden Atomen zurückzulegen.

Bildlich gesprochen lässt sich sagen, dass die beiden Atome in diesem Fall eine Art „Quanten-Pong“ miteinander spielen. Wie beim richtigen Pong [104] ist es wahrscheinlicher, dass mit längerer Spieldauer einer der beiden Mitspieler den Ball nicht zurückschlägt<sup>4</sup>. Dementsprechend ist die Amplitude der atomaren, strahlenartigen Besetzungsmaxima in den Abbildungen mit wachsender Simulationszeit  $t$  gedämpft. Gleichzeitig werden die Besetzungsmaxima mit der Zeit breiter, was daran liegt, dass das bei stärkerer Kopplung emittierte Photon räumlich schmaler und damit spektral breiter ist und somit stärkere Dispersion aufgrund der Nichtlinearität der Dispersionsrelation erfährt. Dies ist bereits zu Beginn des Abschnitts 5.3 beschrieben worden.

Anhand der Abbildungen 5.10, 5.11 und 5.12, jeweils c) und d), ist erkennbar, dass für den Fall  $E_{\uparrow\downarrow} = \hbar\omega_0 - \sqrt{2}|J|$  der Einfluss der PZ auf die Emissionsdynamik signifikant größer ist, als im Fall  $E_{\uparrow\downarrow} = \hbar\omega_0$  und den Einfluss der CZ auf die Dynamik, der für kurze Abstände  $L$  im anderen Fall noch vorhanden war, vollständig verdrängt hat und in diesem Bereich dominant ist. Im Bereich bis  $L = 9\alpha$

<sup>4</sup>Beim „richtigen“ Pong hängt die Rückschlagwahrscheinlichkeit natürlich sehr von der Geschicklichkeit der Spieler ab. Beim hier vorgestellten „Quanten-Pong“ sind die Atome in allen Parametern, außer dem Kopplungsort gleich. Dies würde beim „richtigen“ Pong dem Fall entsprechen, dass beide Spieler das gleiche Talent für dieses Spiel aufweisen. Welches Atom beim „Quanten-Pong“ gewinnt, entscheidet am Ende die Messung.



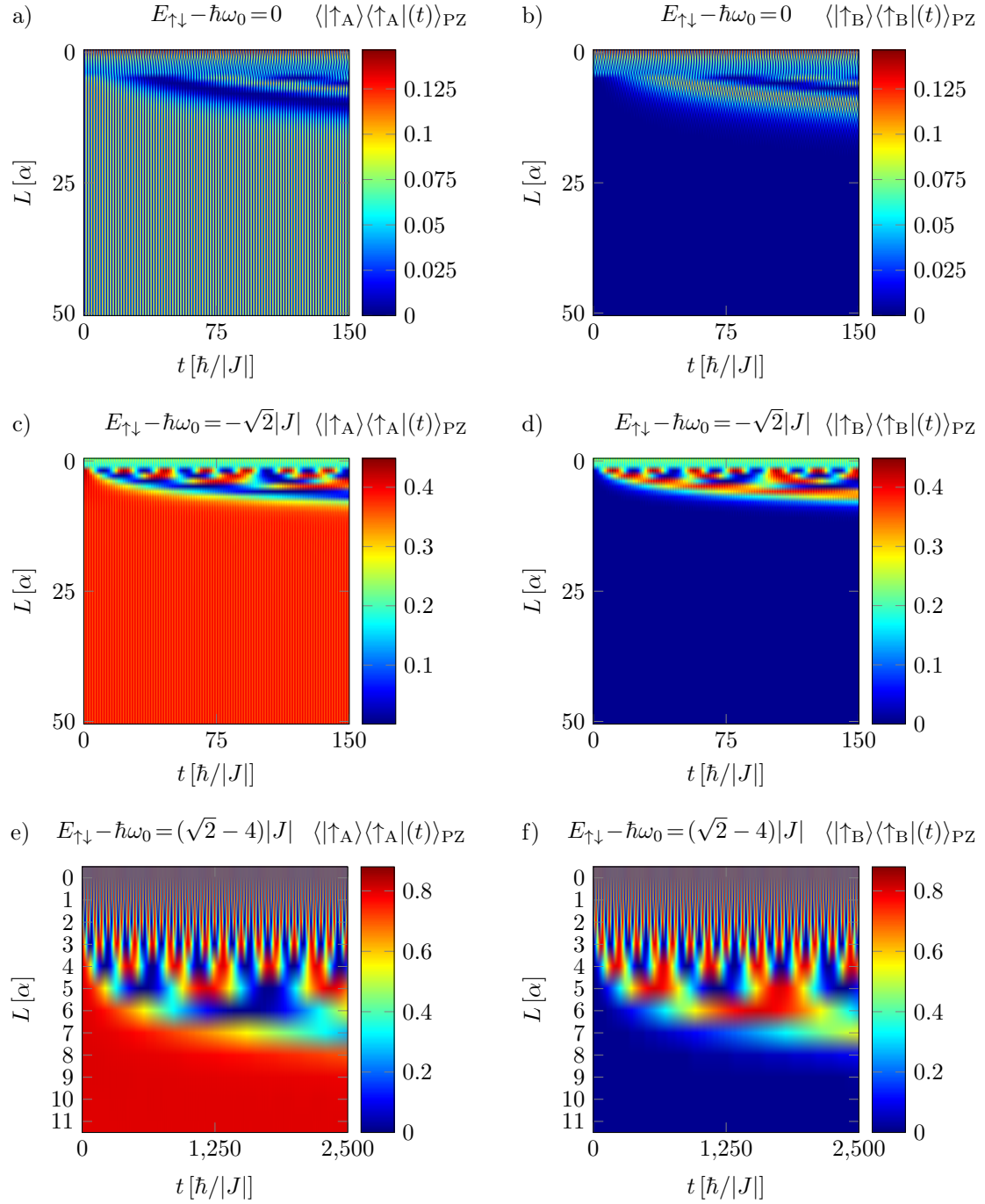


Abbildung 5.11: Anregung der Atome  $\langle |\uparrow_l\rangle \langle \uparrow_l| (t) \rangle$  mit  $l \in \{A, B\}$  über der Simulationszeit  $t$  und dem Abstand der Atome  $L$  für den Fall starker Kopplung und für den Anfangszustand  $|\Psi(0)\rangle_{\text{PZ}}$ , in dem nur PZ angeregt sind. Weitere Details sind dem Fließtext zu entnehmen. Die übrigen Simulationsparameter sind  $J < 0$  und der Wellenleiter wurde durch  $N = 10000$  Gitterplätze modelliert.

## 5 Dynamik der Photonemission zweier Zweiniveausysteme in einem eindimensionalen Wellenleiter

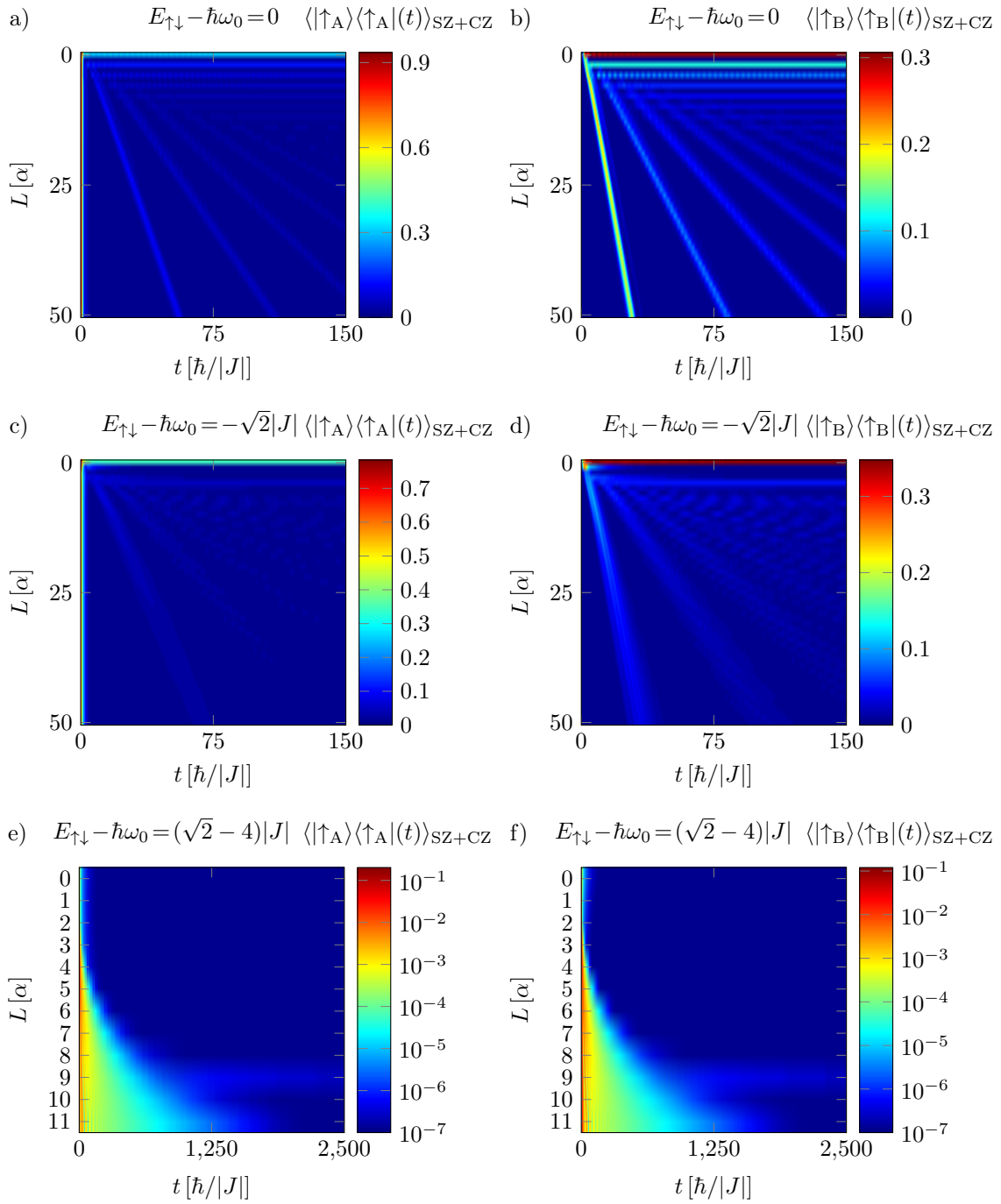


Abbildung 5.12: Anregung der Atome  $\langle |\uparrow_l\rangle\langle\uparrow_l|(t) \rangle$  mit  $l \in \{A, B\}$  über der Simulationszeit  $t$  und dem Abstand der Atome  $L$  für den Fall starker Kopplung und für den Anfangszustand  $|\Psi(0)\rangle_{\text{CZ}}$ , in dem nur CZ angeregt ist. Weitere Details sind dem Fließtext zu entnehmen. Die übrigen Simulationsparameter sind  $J < 0$  und der Wellenleiter wurde durch  $N = 10000$  Gitterplätze modelliert.

zeigen sich Oszillationen mit einem Verhalten analog zu dem, wie es oben für den Fall schwacher Kopplung mit  $E_{\uparrow\downarrow}$  *außerhalb* des Wellenleiterbandes beschrieben wurde. Für Abstände  $L > 9\alpha$  ist der Einfluss der PZ und der SZ auf die Emissionsdynamik gleichwertig: Es zeigt sich das oben beschriebene „Quanten-Pong“-Spiel, allerdings in schwächerer Ausprägung. Dazu zeigt die Besetzung des zunächst angeregten Atoms einen konstanten Achsversatz mit darauf modulierten, hochfrequenten Oszillationen niedriger Amplitude, was beides durch den Einfluss der PZ hervorgerufen wird.

Im Fall starker Kopplung liegen die Lokalisierungslängen der PZ für  $E_{\uparrow\downarrow} - \hbar\omega_0 = (\sqrt{2} - 4)|J|$  bei  $1\alpha \lesssim \xi \lesssim 5\alpha$ , wobei  $\xi \approx 1.1\alpha$  für die am stärksten angeregten PZ im Anfangszustand  $|\Psi(0)\rangle$  aus Gleichung (5.7) gilt. Aus diesem Grund verläuft die zeitliche Entwicklung der atomaren Besetzungen für diesen Fall, in dem  $E_{\uparrow\downarrow}$  unterhalb des Wellenleiterbandes liegt, analog zur gleichen Situation mit schwacher Kopplung. Im Falle starker Kopplung, also mit längerem  $\xi$ , sind die Oszillationsfrequenzen für kleine Abstände entsprechend größer. Außerdem treten die Oszillationen erst für Abstände  $L > 9\alpha$  nicht mehr auf. Aufgrund der größeren Lokalisierungslänge in Verbindung mit der starken Kopplung emittiert das zunächst angeregte Atom im Fall  $L > 9\alpha$ , obwohl die Strahlung nicht propagieren kann, 40% seiner Anregung in den photonischen, lokalisierten Anteil des PZ und bleibt selbst zu 60% angeregt.

## 5.4 Kollektive Emission, Super- und Subradianz

In diesem Abschnitt untersuche ich das kollektive Emissionsverhalten der beiden Atome im Wellenleiter im Falle schwacher Kopplung  $|J|/V^2 = 100|J|^{-1}$  und wenn die atomare Übergangsenergie mitten im Band des Wellenleiters liegt, das heißt  $E_{\uparrow\downarrow} = \hbar\omega_0$ . Die beiden Atome sollen sich zu Beginn in einer gleichwertigen Überlagerung befinden, während der Wellenleiter analog zur Situation in Abschnitt 5.3 keinerlei Anregung aufweisen soll.

Der Anfangszustand  $|\Psi(0)\rangle$  lautet in diesem Fall

$$|\Psi(0)\rangle \equiv |\Delta\varphi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |\mathbf{0}, \uparrow_A \downarrow_B\rangle + e^{i\Delta\varphi} |\mathbf{0}, \downarrow_A \uparrow_B\rangle \right). \quad (5.10)$$

In dieser Gleichung ist  $\Delta\varphi$  eine relative Phasendifferenz zwischen den Subräumen, in denen einmal das Atom am Ort  $x_A$  und einmal das Atom am Ort  $x_B$  vollständig angeregt ist. Die Atome sind in diesem Zustand maximal verschränkt.

Wie in Abschnitt 5.2.1 beschrieben, ist das hier untersuchte System im Falle  $L = 0$  und im Unterraum einer Anregung äquivalent zu einem Wellenleiter, in den ein entartetes V-System eingebettet ist, so dass bei diesem Abstand auch im hier untersuchten System dunkle Zustände auftreten. Aus den Gleichungen (3.11) bis (3.11a) folgt somit, dass sich das hier untersuchte System für  $L = 0$  in einem dunklen Zustand befindet, wenn  $\Delta\varphi = \pi$  im Anfangszustand  $|\Psi(0)\rangle$  aus Gleichung (5.10). Im bei  $L = 0$  und im Zustand  $|\Psi(0)\rangle = |\pi\rangle$  initialisierten System sollte somit die Emission der Atome in den Wellenleiter vollständig unterdrückt sein.

In Abbildung 5.13 ist die zeitliche Entwicklung der atomaren Besetzungen  $\langle |\uparrow_{A/B}\rangle \langle \uparrow_{A/B} | (t) \rangle_{\Delta\varphi}$  in Abhängigkeit des Abstands  $L$  der beiden Atome voneinander und der Simulationszeit  $t$  für Phasendifferenzen  $\Delta\varphi \in \{0, \pi/2, \pi, 3\pi/2\}$  gezeigt. Dabei zeigt sich für  $L = 0$  und  $\Delta\varphi = \pi$ , also wenn das System im dunklen Zustand präpariert wird, das erwartete Verhalten: Die Atome bleiben jeweils zur Hälfte angeregt und emittieren nicht in den Wellenleiter. Ansonsten ist das Emissionsverhalten für die

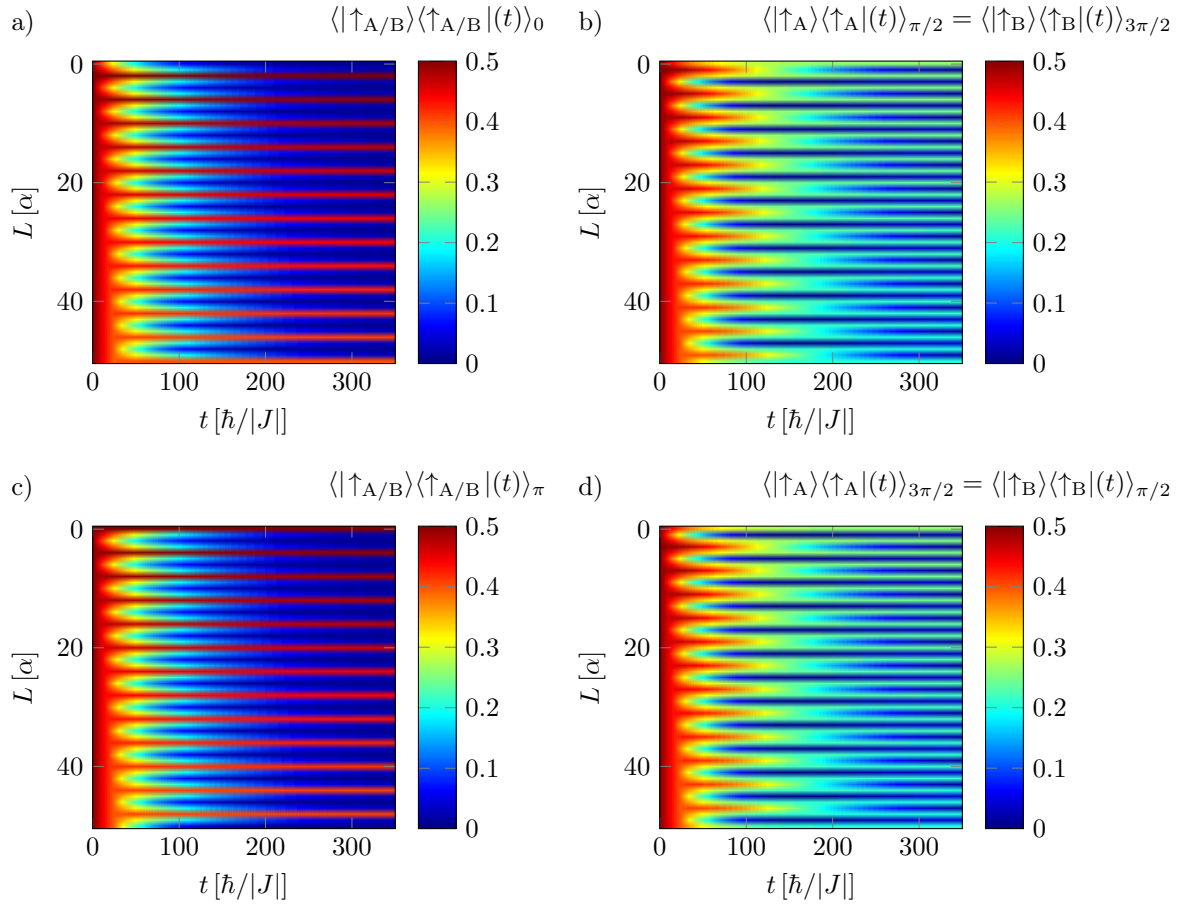


Abbildung 5.13: Anregung der Atome  $\langle |\uparrow_l\rangle \langle \uparrow_l|(t) \rangle$  mit  $l \in \{A, B\}$  über der Simulationszeit  $t$  und dem Abstand der Atome  $L$  für den Fall schwacher Kopplung im Fall kollektiver Anregung der beiden Atome in den Zuständen a)  $|\Delta\varphi = 0\rangle$ , b) und d)  $|\pi/2\rangle$  und  $|3\pi/2\rangle$  und c)  $|\pi\rangle$ . Weitere Details sind dem Fließtext zu entnehmen. Die übrigen Simulationsparameter sind  $J < 0$ ,  $E_{\uparrow\downarrow} = \hbar\omega_0$  und der Wellenleiter wurde durch  $N = 10000$  Gitterplätze modelliert.

Fälle  $\Delta\varphi = \pi/2$  und  $\Delta\varphi = 3\pi/2$  sehr ähnlich zur zeitlichen Entwicklung der atomaren Besetzungen im Fall, dass nur ein Atom anfangs angeregt ist: Existiert bei gegebenem Abstand  $L$  unter den Eigenzuständen ein CZ, was hier bei jedem geradzahigen Abstand der Fall ist, so ist dieser CZ bei der Emission angeregt und die Atome bleiben zu einem gleichen, konstanten Anteil besetzt. Für diesen konstanten Anteil gilt

$$\langle |\uparrow_{A/B}\rangle \langle \uparrow_{A/B}| (t_{\max}) \rangle_{\pi/2} = \langle |\uparrow_{B/A}\rangle \langle \uparrow_{B/A}| (t_{\max}) \rangle_{3\pi/2} \leq 0.25,$$

wobei der Wert 0.25 wie für den Fall, dass zunächst ein Atom angeregt ist, nur für  $L = 0$  erreicht wird.

Gilt allerdings  $\Delta\varphi \in \{0, \pi\}$  im Anfangszustand, so unterscheidet sich das Emissionsverhalten deutlich von der Situation, dass zunächst nur ein Atom angeregt ist. Ist  $\Delta\varphi = 0$ , so führt der Emissionsprozess nur für Abstände  $L = 2(2n + 1)\alpha$  mit  $n \in \{0, 1, 2, \dots\}$  zu einer konstanten Langzeitbesetzung, also nur für jeden zweiten Abstand  $L$ , für den das System einen CZ aufweist. Ist  $\Delta\varphi = \pi$ , so tritt die konstante Langzeitbesetzung für  $L = 4n\alpha$  mit  $n \in \{0, 1, 2, \dots\}$  auf, also genau für die CZ, für die die Langzeitbesetzung im Falle von  $\Delta\varphi = 0$  gerade nicht auftritt.

Dies lässt sich folgendermaßen erklären: Der dunkle Zustand, sowie alle CZ mit  $L = 4n\alpha$  sind antisymmetrisch bezüglich der Vorzeichen der Besetzungsamplituden der atomaren Anregungszustände  $|\uparrow_{A/B}\rangle$ . Somit verschwindet deren Überlapp  ${}_a\langle \text{CZ} | \Delta\varphi = 0 \rangle$  des antisymmetrischen Kavitätszustands  $|\text{CZ}\rangle_a$  und dem Zustand  $|\Delta\varphi = 0\rangle$ . Alle CZ mit  $2(2n + 1)\alpha$  sind wiederum symmetrisch bezüglich dieses Vorzeichens, so dass deren Überlapp  ${}_s\langle \text{CZ} | \pi \rangle$  mit dem Zustand  $|\pi\rangle$  verschwindet. Aus diesem Grund emittieren die Atome in den Zuständen  $|\Delta\varphi = 0\rangle$  und  $|\pi\rangle$  ihre Anregung auch dann in jedem zweiten Fall vollständig in den Wellenleiter, obwohl unter den Eigenzuständen des Systems ein CZ zu finden ist.

Bezüglich des Emissionsverhaltens der Atome stellt sich nun die Frage nach deren kollektiver Emissionsrate<sup>5</sup>  $\Gamma_L^{(\Delta\varphi)}$  in Abhängigkeit des Abstands  $L$  und der Phasendifferenz  $\Delta\varphi$ . Für ein einzelnes, in einen Wellenleiter eingebettetes 2NS gilt, wenn  $E_{\uparrow\downarrow}$  im Zentrum des Wellenleiterbandes liegt, dass

$$E_{\uparrow\downarrow} - \hbar\omega_0 = 0 = 2|J| \cos(k_0\alpha) \Rightarrow k_0 = \frac{\pi}{2\alpha}, \quad (5.11)$$

und somit ergibt sich für die Emissionsrate

$$\Gamma_{E_{\uparrow\downarrow}=\hbar\omega_0}^{2\text{NS}} = \tau^{-1} \left( \frac{\pi}{2\alpha} \right) \stackrel{(5.8)}{=} 0.01 |J| \hbar^{-1}. \quad (5.12)$$

Bei der kollektiven Emission der beiden Atome gibt es einen ausgezeichneten Zeitpunkt

$$t_{\text{frei}} = \frac{L}{|v_g(k_0)|}. \quad (5.13)$$

Bis zu  $t_{\text{frei}}$  sollten die Atome kollektiv mit der Emissionsrate  $\Gamma_{E_{\uparrow\downarrow}=\hbar\omega_0}^{2\text{NS}}$  aus Gleichung (5.12), also wie ein einzelnes 2NS, emittieren, da die von jedem der Atome emittierte Strahlung genau den Zeitraum bis  $t_{\text{frei}}$  benötigt, um das jeweils andere Atom zu erreichen. Erst nach  $t_{\text{frei}}$  sollten sich kollektive Emissionsphänomene in dem zweiatomigen System manifestieren.

<sup>5</sup>Verläuft ein Emissionsprozess exponentiell in der Zeit, das heißt  $\propto e^{-t/\tau}$ , dann ist die Emissionsrate definiert durch  $\Gamma = \tau^{-1}$ .

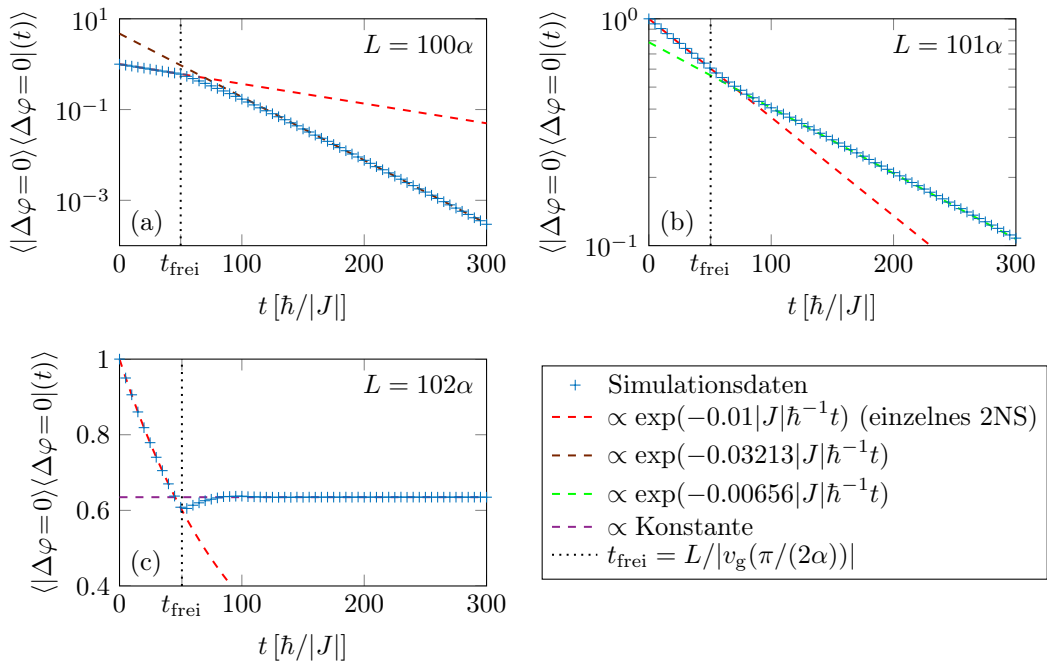


Abbildung 5.14: Zeitentwicklung der Besetzung des Zustands  $|\Delta\varphi = 0\rangle$  für die Abstände a)  $L = 100\alpha$ , b)  $L = 101\alpha$  und c)  $L = 102\alpha$  über der Simulationszeit  $t$ . Für eine bessere Übersicht ist nur jeder 25. Datenpunkt der Simulationen gezeigt. In allen drei Abbildungen sind für den Zeitraum vor und nach  $t_{\text{frei}}$  exponentielle Ausgleichslinien eingezeichnet und deren funktionale Abhängigkeit angegeben. Die übrigen Simulationsparameter sind die aus Abbildung 5.13.

In Abbildung 5.14 ist zeitliche Entwicklung der Besetzung des Zustandes  $|\Delta\varphi = 0\rangle$  für drei verschiedene Abstände  $L = 100\alpha$ ,  $L = 101\alpha$  und  $L = 102\alpha$  gezeigt. Im ersten Fall weist das System einen antisymmetrischen CZ auf, der bei diesem Anfangszustand nicht angeregt ist. Für  $L = 101\alpha$  findet man unter den Eigenzuständen des Systems kein CZ, im Fall von  $L = 102\alpha$  existiert ein symmetrischer CZ, dessen Anregung aus Abbildung 5.14 ersichtlich ist.

Zunächst zeigt sich jedoch in dieser Abbildung, dass wie erwartet die Emission bis zum Zeitpunkt  $t_{\text{frei}}$  für alle drei Abstände mit der Rate  $\Gamma_{E_{\uparrow\downarrow}=\hbar\omega_0}^{2\text{NS}}$  eines einzelnen 2NS abläuft. Ab diesem Zeitpunkt setzt ein für alle drei Abstände unterschiedliches, kollektives Emissionsverhalten ein:

Im Falle von  $L = 100\alpha$  steigt ab diesem Zeitpunkt die Emissionsrate auf  $\Gamma_{100\alpha}^{(0)} \approx 0.03213|J|\hbar^{-1}$  und ist damit dreimal so hoch wie im Falle eines einzelnen 2NS. Dies ist die Manifestation einer zwei-atomigen *Superradianz* [105]. Befinden sich gleichartige Atome in einem superradianten Zustand, so emittieren diese eine kollektiv auf alle Atome gleichverteilte Anregung schneller, als ein einzelnes, angeregtes Atom von gleicher Art. Dieser Effekt tritt für zwei 2NS, die in einen 1D Wellenleiter eingebettet sind, nach den hier gewonnenen Erkenntnissen also genau dann auf, wenn der Anfangszustand aus Symmetriegründen keinen Überlapp mit einem unter den Eigenzuständen vorhandenen CZ aufweist.

Für den Abstand  $L = 101$ , also im Falle dass das System keinen CZ unter den Eigenzuständen aufweist, zeigt sich ein anderes Verhalten: Hier sinkt die Emissionsrate ab  $t_{\text{frei}}$  um etwa ein Drittel

im Vergleich zum einzelnen Atom auf den Wert  $\Gamma_{101\alpha}^{(0)} \approx 0.00656|J|\hbar^{-1}$ . Dies ist der zur Superradianz komplementäre Effekt, der als *Subradianz* [106] bezeichnet wird. In einem subradianen Zustand „bremsen“ sich gemeinsam angeregte Atome gegenseitig bei der Emission aus, so dass ihre gemeinsame Emissionsrate kleiner ist, als die von einem einzelnen Atom.

In Abbildung 5.14 zeigt sich für den Abstand  $L = 102\alpha$  ab dem Zeitpunkt  $t_{\text{frei}}$  Subradianz in ihrer maximal möglichen Ausprägung: In diesem System, in dem ein symmetrischer CZ unter den Eigenzuständen existiert und im Anfangszustand  $|\Delta\varphi = 0\rangle$  somit angeregt ist, hören die Atome ab  $t_{\text{frei}}$  auf zu emittieren. Die Atome absorbieren sogar wieder kurzzeitig bereits emittierte Strahlung, um dann für alle folgenden Zeiten konstant besetzt zu bleiben. Die Emissionsrate  $\Gamma_{100\alpha}^{(0)}$  ist in diesem Fall ab  $t_{\text{frei}}$  somit kurzzeitig bis etwa zu einem Zeitpunkt  $t = t_{\text{frei}} + 50\hbar/|J|$  negativ und ist ab dann identisch null.

Dieser Effekt ist auf den in dieser Situation stark angeregten CZ zurückzuführen. Da die Existenz von CZ im Falle punktförmiger Emittoren eine spezielle Eigenschaft von 1D Systemen ist, ist auch diese maximale Subradianz, die sich hier einstellt, eine exklusive Eigenschaft der Eindimensionalität des hier untersuchten Systems.

Abschließend lässt sich aus Abbildung 5.15 die Abhängigkeit der Emissionsraten  $\Gamma_L^{(\Delta\varphi)}$  ab dem Zeitpunkt  $t_{\text{frei}}$  vom Abstand  $L$  für die vier Anfangszustände  $|\Delta\varphi = 0\rangle$ ,  $|\pi/2\rangle$ ,  $|\pi\rangle$  und  $|3\pi/2\rangle$  nach Gleichung (5.10) entnehmen. Hier zeigt sich, dass für die Zustände  $|\Delta\varphi = 0\rangle$  und  $|\pi\rangle$  immer dann die maximale Subradianz auftritt, wenn bei Abstand  $L$  ein CZ existiert, der im jeweiligen Anfangszustand entsprechend der Symmetrie des CZ auch angeregt ist. In den Fällen von  $|\pi/2\rangle$  und  $|3\pi/2\rangle$  sind sowohl die symmetrischen, als auch die antisymmetrischen CZ im Anfangszustand angeregt, so dass hier bei jedem geradzahigen  $L$  die maximale Subradianz auftritt.

Ist ein existierender CZ in einem der Anfangszustände  $|\Delta\varphi = 0\rangle$  beziehungsweise  $|\pi\rangle$  nicht angeregt, tritt im System Superradianz auf mit  $\Gamma_L^{(0/\pi)} > \Gamma_{E_{\uparrow\downarrow}=\hbar\omega_0}^{\text{NS}}$ . Interessanterweise nimmt die Superradianz in diesem Fall mit wachsendem Abstand  $L$  zu. Dies ist erneut eine Eigenschaft der Eindimensionalität des betrachteten Systems: In diesem Fall „trifft“ die Hälfte der von einem der Atome emittierte Strahlung das andere Atom in jedem Fall. Bei größeren Abständen  $L$  ist  $t_{\text{frei}}$  größer und damit die absolute Besetzung der Atome kleiner, während die absolute photonische Besetzung, die zu  $t_{\text{frei}}$  die Atome vom jeweils anderen Atom erreicht und die kollektive Emission induziert, für alle  $L$  gleich groß ist<sup>6</sup>. Sieht man Superradianz als eine Art stimulierte Emission an, so wird klar, dass die Emissionsrate für große  $L$  im 1D superradianen Fall zunehmen muss: Das Verhältnis aus atomarer Restanregung zu der zur Emission stimulierenden photonischen Anregung am Ort des Atoms wird mit größerem  $L$  entsprechend exponentiell kleiner, wodurch die verbleibende atomare Restanregung von der umgebenden Strahlung stärker aus dem Atom „herausgesaugt“ wird. Dies kann natürlich nur soweit funktionieren, wie zu  $t_{\text{frei}}$  noch Restanregung in den Atomen vorhanden ist.

Im Falle ungeradzahiger Abstände  $L$ , in dem entsprechend keine CZ unter den Eigenzuständen der Systeme existieren, tritt für alle vier Anfangszustände laut Abbildung 5.15 Subradianz auf, wobei diese ebenso wie die Superradianz mit größerem  $L$  abnimmt. Die vom jeweils anderen Atom emittierte Strahlung unterdrückt den Emissionsprozess des anderen Atoms, sobald sie dieses erreicht hat. Dieser Effekt verstärkt sich aus den gleichen Gründen für größere Abstände, wie im Falle der Superradianz.

<sup>6</sup>In einem 3D System ist das Emissionsprofil eines Atoms in erster Näherung kugelförmig. Daher würde bei größerem Abstand  $L$  die von einem Atom emittierte photonische Besetzung, die das andere Atom zum Zeitpunkt  $t_{\text{frei}}$  erreicht,  $\propto L^{-2}$  abnehmen. In einem 2D System verlief die Emission radial und die Abnahme der photonischen Besetzung wäre  $\propto L^{-1}$ .

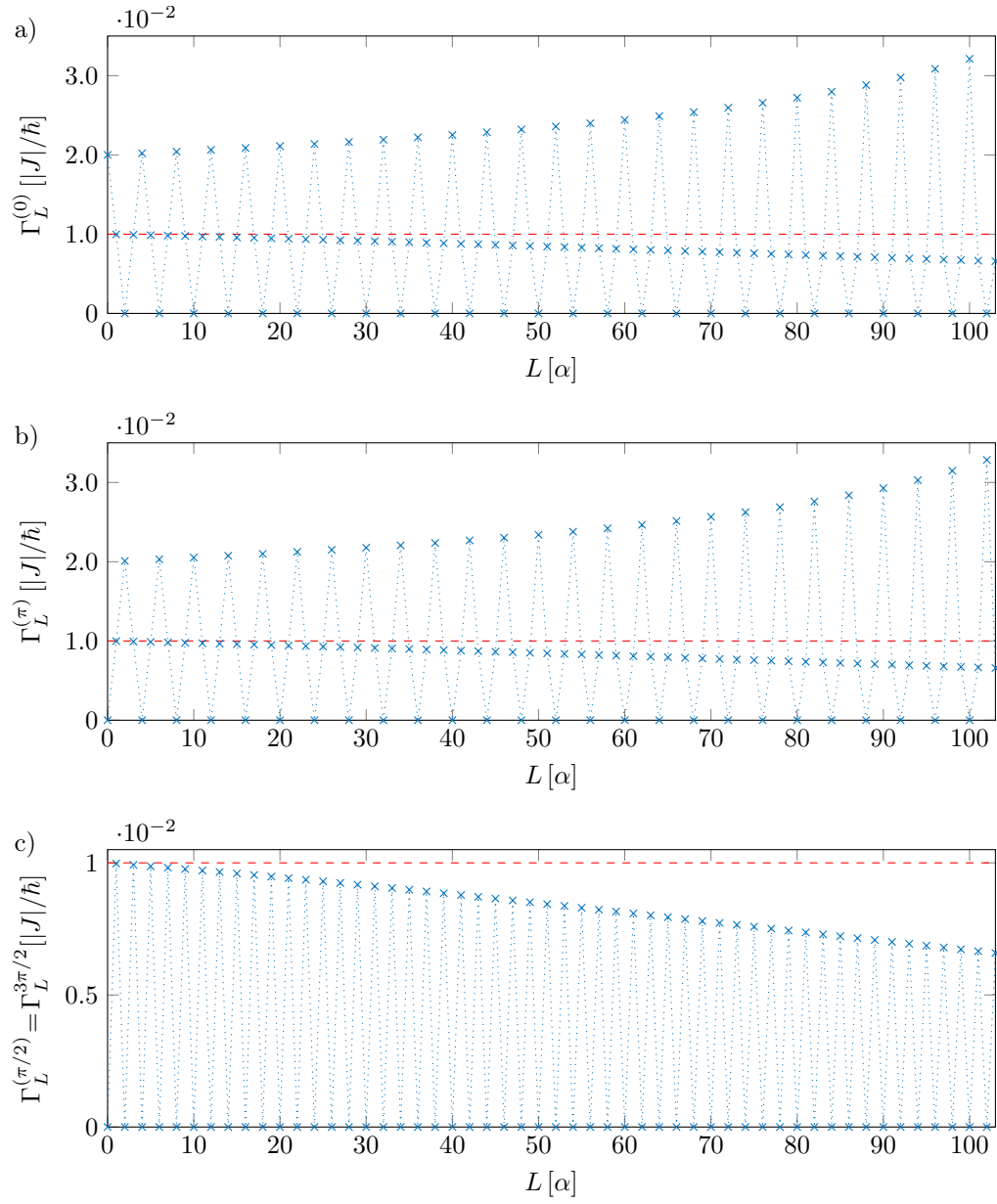


Abbildung 5.15: Emissionsraten a)  $\Gamma_L^{(0)}$ , b)  $\Gamma_L^{(\pi)}$  und c)  $\Gamma_L^{(\pi/2)} = \Gamma_L^{(3\pi/2)}$  in Abhängigkeit des atomaren Abstands  $L$ . Die rote gestrichelte Linie markiert den Wert  $\Gamma_{E_{\uparrow\downarrow}=\hbar\omega_0}^{2NS}$  eines einzelnen 2NS. Weitere Details siehe Text. Die übrigen Simulationsparameter sind die aus Abbildung 5.13.



## 5.5 Zusammenfassung

In diesem Kapitel habe ich die Emissionsdynamik zweier gleichartiger, in einen Wellenleiter eingebetteter 2NS untersucht. Dazu habe ich zunächst herausgearbeitet, dass in dem System neben SZ auch PZ existieren, die auch als gebundene Atom-Photon-Zustände bezeichnet werden. Diese zeichnen sich dadurch aus, dass ihre Eigenenergie außerhalb des photonischen Wellenleiterbandes liegt. In einem PZ sind die Atome partiell angeregt, während die Strahlung im Wellenleiter um die Orte, an denen die Atome eingebettet sind, stark exponentiell lokalisiert ist.

Des Weiteren habe ich die CZ diskutiert. Dies sind kavitätsartige Eigenzustände des Systems, in denen zwischen den Atomen eine stehende Welle photonischer Anregung „gefangen“ ist. Diese Zustände werden auch als gebundene Zustände im Kontinuum bezeichnet, da sie energetisch im Kontinuum der SZ liegen. Die Existenz der CZ ist abhängig vom Abstand der Atome beziehungsweise von deren Übergangsenergie.

Ich habe die Emissionsdynamik eines Atoms im Falle schwacher und starker Kopplung für verschiedene atomare Übergangsenergien diskutiert. Dabei hat sich gezeigt, dass im Falle schwacher Kopplung und wenn ein CZ im System existiert, die Atome durch den Emissionsprozess im Grenzfall langer Zeiten konstant besetzt bleiben und somit verschränkt sind. Diese Verschränkung ist umso größer, je geringer der Abstand zwischen den Atomen ist. Im Falle starker Kopplung tritt dieser Effekt nicht mehr auf. Dafür kann es hierbei dazu kommen, dass die Atome „Quanten-Pong“ spielen, also ein Wellenpaket photonischer Anregung zwischen beiden Atomen hin und her reflektiert wird, wobei dessen Intensität mit der Zeit abnimmt, da die Atome das Paket aufgrund dessen endlicher spektraler Breite nicht vollständig reflektieren.

Sowohl bei starker, als auch bei schwacher Kopplung ist die Emissionsdynamik rein durch die PZ dominiert, wenn die atomare Übergangsenergie außerhalb des photonischen Bandes des Wellenleiters liegt. Aufgrund der starken Lokalisierung der Strahlung in einem PZ findet ein Anregungsaustausch zwischen den Atomen nur für Abstände in der Größenordnung der Lokalisierungslänge der Strahlung in den PZ statt.

Teilen sich die Atome im Falle schwacher Kopplung eine Anregung, so kommt es, wenn die atomare Übergangsenergie mitten im Wellenleiterband liegt, abhängig von der relativen Phase der Atome und von der Existenz und der Art eines CZ im System zu Super- oder Subradianz. Dabei kann bei der Anregung eines CZ die maximal mögliche Subradianz erzielt und der Emissionsprozess gestoppt werden. Die Atome sind auch dann wieder verschränkt. Im Falle von Superradianz nehmen die Emissionsraten mit steigendem atomaren Abstand zu, was auf die Eindimensionalität des Systems zurückzuführen ist. Im subradianen, „CZ-freien“ Fall nimmt die Emissionsrate entsprechend mit steigendem Abstand ab. Dabei ist zu beachten, dass diese Effekte erst ab dem Zeitpunkt auftreten, zu dem die emittierte Strahlung das jeweils andere Atom erreicht hat.



# 6 ZUSAMMENFASSUNG & AUSBLICK

Nachdem ich in den vorangegangenen Kapiteln die Ergebnisse meiner Studien auf dem Gebiet der Wellenleiterquantenelektrodynamik (WQED) präsentiert habe, fasse ich in diesem Kapitel diese Ergebnisse noch einmal zusammen. Anschließend gebe ich einen kurzen Ausblick auf weitere, interessante und offene Fragen auf dem Gebiet der WQED.

## 6.1 Zusammenfassung

In dieser Arbeit habe ich physikalische Phänomene auf dem Gebiet der WQED untersucht. Dabei ging es im Speziellen darum, welche Effekte bei der Licht-Materie-Wechselwirkung zwischen einzelnen Photonen in einem eindimensionalen (1D) Wellenleiter und einzelnen, in diesen Wellenleiter eingebetteten quantenmechanischen Mehrniveausystemen auftreten können. Für meine Untersuchungen habe ich hauptsächlich numerische Methoden verwendet.

In Kapitel 1 habe ich Grundlagen der WQED präsentiert. Dies schloss einen kurzen Abriss der klassischen Feldtheorie der elektromagnetischen Strahlung in einem Dielektrikum und die kanonische Quantisierung dieser Theorie ein. Ich habe Eigenschaften des quantisierten, elektromagnetischen Feldes diskutiert und bin auf die Modellierung der Wechselwirkung dieses Feldes mit quantenmechanischen Mehrniveausystemen im Rahmen der Dipolkopplung und der Drehwellennäherung (RWA) eingegangen. Zum Abschluss des Kapitels habe ich beschrieben, wie 1D Wellenleiter als 1D Modenkontinuum des elektromagnetischen Feldes modelliert werden.

In Kapitel 2 habe ich vorgestellt, wie ich das Computerprogramm implementiert habe, mit dem ich den numerischen Anteil der in dieser Arbeit präsentierten Untersuchungen durchgeführt habe. Hierzu habe ich zunächst die Grundlagen der Zeitentwicklung quantenmechanischer Zustände im Schrödingerbild rekapituliert, da das Computerprogramm diese Zeitentwicklung für Zustände in einem WQED System simuliert. Ich bin auf Krylov-Unterraum-Verfahren eingegangen, da ein solches Verfahren die Basis des Computerprogramms bildet. Zum Schluss habe ich Ergebnisse von Konvergenzstudien mit dem Programm präsentiert.

Phänomene, die bei der Streuung einzelner Photonen in 1D Wellenleitern mit eingebetteten Dreiniveausystemen (3NS) auftreten, habe ich in Kapitel 3 untersucht. Es wurden sowohl ungetriebene, als auch getriebene V- und  $\Lambda$ -Systeme betrachtet. Ich habe demonstriert, dass im Falle eines ungetriebenen, fast entarteten V-Systems die Anregung *nahezu* dunkler Zustände (NDZ) zu einer verlangsamten Reemission des gestreuten Photons führen kann. Außerdem habe ich beschrieben, wie im Falle eines entarteten  $\Lambda$ -Systems die Streuung des Photons durch eine relative Phasendifferenz zwischen den unte-

ren Zuständen des 3NS beeinflusst wird. Beträgt diese Phasendifferenz  $\pi$ , so befindet sich dieses System in einem nichtstationären, dunklen Zustand. In diesem wird ein Photon unabhängig von allen weiteren Systemparametern vollständig transmittiert. Wird das  $\Lambda$ -System getrieben, lässt sich diese Situation mit Hilfe des treibenden Feldes „erzwingen“. Dies ist eine elektromagnetisch induzierte Transparenz (EIT) mit einem einzelnen Photon und einem einzelnen Atom. Ich habe gezeigt, dass sich dies auch umkehren lässt. In diesem Fall wird das Photon nur aufgrund geeignet gewählter Parameter des treibenden Feldes vom 3NS fast vollständig reflektiert. Am Ende des Kapitels habe ich gezeigt, dass sich die Impulsverteilung eines an einem getriebenen V-System gestreuten Photons mit Hilfe des treibenden Feldes gezielt beeinflussen lässt.

In Kapitel 4 habe ich dargelegt, wie der Formalismus der Schmidt-Zerlegung auf WQED Systeme angewendet werden kann, um Verschränkung zwischen Licht in Wellenleitern und darin eingebetteten Mehrniveausystemen zu quantifizieren. Es hat sich ergeben, dass die Besetzungszahlen atomarer Zustände direkten Zugang zu der Schmidt-Zahl beziehungsweise der von Neumann Entropie bieten. Letztere sind zwei Maße für Verschränkung. Mit diesem Rüstzeug an der Hand habe ich untersucht, inwieweit die Erzeugung von Verschränkung zwischen dem Licht im Wellenleiter und einem  $\Lambda$ -System durch Streuung eines Einzelphotonwellenpakets am 3NS von der Form der Einhüllenden des Wellenpakets abhängt. Dabei hat sich ergeben, dass die Größe des dabei erzielten Verschränkungsgrades maßgeblich durch die Breite der Einhüllenden im Impulsraum ( $k$ -Raum) und durch die atomaren Emissionszeiten bestimmt wird.

Zum Abschluss habe ich in Kapitel 5 Ergebnisse zur Emissionsdynamik zweier an unterschiedlichen Orten in einen Wellenleiter eingebetteter Zweiniveausysteme (2NS) dargelegt. Hierzu habe ich zunächst die Eigenzustände, die in diesem System auftreten können, klassifiziert. Neben Streuzuständen (SZ) sind dies Kavitätszustände (CZ) und polaritonische Zustände (PZ). Ich habe die Dynamik dieses Systems für den Fall untersucht, dass zunächst ein 2NS angeregt ist. Im Falle schwacher Kopplung hat sich gezeigt, dass die vollständige Emission des Atoms unterdrückt werden kann, selbst wenn die atomare Übergangsenergie mitten im Wellenleiterband liegt. Dies folgt aus der Anregung von CZ in diesem System. In diesem Fall bleiben beide 2NS im Grenzfall langer Zeiten teilweise angeregt und verschränkt. Bei starker Kopplung kann es dazu kommen, dass nach der Emission ein Anteil der emittierten Strahlung als Wellenpaket zwischen den 2NS hin und her reflektiert wird. Liegt die Übergangsenergie der 2NS außerhalb des Wellenleiterbandes, so ist die Dynamik unabhängig der Stärke der Kopplung durch die PZ und deren Lokalisierungslängen bestimmt. Sind Letztere viel kürzer als der Abstand zwischen den 2NS, so sind Emissionsprozesse vollständig unterdrückt. Sind bei schwacher Kopplung beide 2NS anfangs zur Hälfte angeregt, also maximal verschränkt, so tritt im System Super- oder Subradianz auf. Im subradianen Fall kann es zur vollständigen Unterdrückung der Emission durch Anregung der CZ kommen. Es hat sich gezeigt, dass im Falle der Superradianz die Emissionsraten der beiden 2NS mit wachsendem Abstand zunehmen und im Falle der Subradianz mit wachsendem Abstand abnehmen. Diese Effekte sind in der derartigen Ausprägung eine Eigenschaft der Eindimensionalität des Systems.

## 6.2 Ausblick

An dieser Stelle möchte ich einen kurzen Ausblick über interessante offene Fragen auf dem Gebiet der WQED geben. Einige dieser Fragen haben sich direkt aus den Ergebnissen dieser Arbeit ergeben.

So wurden in dieser Arbeit WQED Systeme im Unterraum einer Anregung untersucht. Wird ein Pho-

ton von einem quantenmechanischen Mehrniveausystem absorbiert, so ändert das Mehrniveausystem seinen Zustand. Im Allgemeinen unterscheiden sich die Eigenschaften dieses „neuen“ Zustands von denen des „alten“. Ein zweites Photon „sieht“ dann andere Eigenschaften des Mehrniveausystems und auch das Mehrniveausystem wird im Allgemeinen anders auf dieses zweite Photon „reagieren“. Ein zweites Photon kann aber erst im Unterraum zweier Anregungen auftreten. Daher hat sich in anderen Arbeiten [56, 57, 63–67, 69, 79–82, 89, 94] gezeigt, dass im Unterraum zweier Anregungen neue Effekte in WQED Systemen auftreten können. Das im Rahmen dieser Dissertation entstandene Computerprogramm ist auch für die Simulation im Unterraum zweier Anregungen ausgelegt<sup>1</sup>. Daher wären erste Fragen, die sich im Anschluss an diese Arbeit stellen: Was ergibt sich bei der Streuung von zwei Photonen an einem einzelnen 3NS? Inwieweit lassen sich hier, analog zum Fall eines 2NS [66, 67], PZ im System anregen und lässt sich dies mit Hilfe treibender Felder steuern?

Im Falle zweier 2NS gibt es die CZ. Obwohl diese energetisch im Kontinuum der SZ liegen, wären die CZ bei der Streuung eines Einzelphotonwellenpakets von „außen“ nicht angeregt, da ein solcher Anfangszustand keinen Überlapp mit den CZ aufwies. Hier stellt sich die Frage, wie es sich bei der Streuung eines Wellenpakets aus zwei Photonen verhält. Wären die CZ auf diese Art über nichtlineare Streuprozesse anregbar? Ließe sich Licht auf diese Art zwischen den Atomen „einfangen“?

Alle bis hierhin gestellten Fragen ließen sich mit dem Simulationsprogramm ohne Erweiterung desselben untersuchen. Im Folgenden möchte ich noch ein paar Fragestellungen aufwerfen, für die das Programm erweitert werden müsste, beziehungsweise für die andere Methoden zur Untersuchung dieser Fragestellungen entwickelt und genutzt werden müssten.

In Experimenten sind Einzelphotonendetektoren Standardinstrumente, um Messungen an quantenoptischen Systemen durchzuführen [108]. Mit ihrer Hilfe lassen sich Quantenkorrelationsfunktionen [109] bestimmen, die Rückschlüsse auf die Statistik und den Zustand des Systems zulassen. Um solche Korrelationsfunktionen als Observablen aus den Simulationen mit dem in dieser Arbeit vorgestellten Computerprogramm zu erhalten, wäre die Kopplung von Simulationen in Unterräumen unterschiedlicher Anregungszahlen vonnöten. Dazu müsste das Programm erweitert werden. Damit ließen sich dann zum Beispiel die Korrelationsfunktionen eines PZ ermitteln, was einen Zugang zur Messung solcher Zustände ermöglichen kann.

Wenn durch Streuung zweier Photonen in einem System ein PZ angeregt wurde, so ist außerdem die Frage offen, ob sich durch Streuung eines dritten Photons an diesem Zustand als „Sonde“ Signaturen der Anregung des PZ gewinnen lassen. Ein erster Ansatz hierzu wurde im Zuge der von mir betreuten Diplomarbeit [56] verwirklicht, in der ein Simulationsaufbau eingerichtet wurde, mit dem sich die Streuung eines Photons an einem schon initialisierten PZ untersuchen lässt. Realistischer wäre allerdings eine Simulation, in der ein Wellenpaket, das aus zwei Photonen besteht, einen PZ durch Streuung an einem 2NS anregt und dann ein drittes Photon an diesem PZ gestreut wird. So eine Simulation liefere im Unterraum dreier Anregungen ab. Auch hierzu müsste das Simulationsprogramm erweitert werden.

Bei zwei in den Wellenleiter eingebetteten 2NS stellt sich die Frage, ob zwischen den 2NS eine Casimirkraft [17] existiert. Hierzu müsste die Grundzustandsenergie des Systems in Abhängigkeit des Abstands zwischen den zwei 2NS bekannt sein. Für eine realistischere Abschätzung dieser Grundzustandsenergie ist es vonnöten, das Modell über die RWA hinaus zu untersuchen. Dies wäre mit Hilfe des im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Computerprogramms nicht möglich, da sich in dem Modell ohne

<sup>1</sup>Im Rahmen der Arbeiten in den Referenzen [56, 57, 94, 107] wurde das Programm für Simulationen im Unterraum zweier Anregungen verwendet.

RWA der Hilbertraum nicht mehr in dimensional beschränkte Sektoren fester Anregungszahl aufspalten lässt. Hier müssten andere Methoden für die Untersuchung verwendet werden.

Außerdem stellt sich die Frage, wie sich Unordnung im Wellenleiter, Verluste und Dekohärenz auf die in dieser Arbeit untersuchten Effekte auswirken. Die Emission eines 2NS in einen ungeordneten Wellenleiter wurde bereits mittels hauptsächlich quantenfeldtheoretischer Methoden untersucht [57, 107]. Außerdem wurden mittels eines Quantensprungsansatzes (englisch quantum jump approach) phänomenologisch die Einflüsse von Dekohärenz und Dissipation auf die gleichzeitige Streuung zweier Photonen an einem 2NS in einem 1D Wellenleiter analog zu einem Hong-Ou-Mandel Experiment untersucht [82]. Es wäre sicherlich vielversprechend, diese beiden Techniken auf die in dieser Arbeit untersuchten Systeme anzuwenden, um damit den Einfluss von Unordnung, Dissipation und Dephasierung in diesen Systemen zu bestimmen.

# A MATHEMATISCHE HILFSMITTEL

## A.1 Die transversale $\delta$ -Distribution

In Abschnitt 1.1 wurde zur Darstellung der Poissonklammer zwischen den kanonisch konjugierten Feldern in Gleichung (1.12) unter der verallgemeinerten Coulomb-Eichbedingung (1.5) die transversale  $\delta$ -Distribution verwendet. Einige Eigenschaften dieser Distribution liste ich im Folgenden auf. Dieser Anhang basiert auf den Referenzen [12] und [22].

Sei  $\mathbf{f}(\mathbf{r})$  ein reelles Vektorfeld im Ortsraum und  $\tilde{\mathbf{f}}(\mathbf{k})$  dessen Fouriertransformierte im  $k$ -Raum. Diese lässt sich zerlegen in eine zu  $\mathbf{k}$  senkrechte Komponente  $\tilde{\mathbf{f}}_{\perp}(\mathbf{k})$  und eine zu  $\mathbf{k}$  parallele Komponente  $\tilde{\mathbf{f}}_{\parallel}(\mathbf{k})$  mit

$$\tilde{\mathbf{f}}_{\parallel}(\mathbf{k}) = \frac{\mathbf{k}}{|\mathbf{k}|^2} (\mathbf{k} \cdot \tilde{\mathbf{f}}(\mathbf{k})) = \hat{P}_{\parallel} \tilde{\mathbf{f}}(\mathbf{k}), \quad (\text{A.1})$$

so dass

$$\mathbf{k} \cdot \tilde{\mathbf{f}}_{\perp}(\mathbf{k}) = 0, \quad (\text{A.2a})$$

$$\mathbf{k} \times \tilde{\mathbf{f}}_{\parallel}(\mathbf{k}) = 0. \quad (\text{A.2b})$$

Mit Hilfe des in Gleichung (A.1) definierten Projektors  $\hat{P}_{\parallel}$  auf zu  $\mathbf{k}$  parallele Komponenten ergibt sich der Projektor auf zu  $\mathbf{k}$  orthogonale Komponenten  $\hat{P}_{\perp}$  aufgrund der Vollständigkeit dieser Projektoren zu

$$\hat{P}_{\perp} = \mathbb{1} - \hat{P}_{\parallel}. \quad (\text{A.3})$$

Die Rücktransformation von  $\tilde{\mathbf{f}}(\mathbf{k})$  in den Ortsraum unter Beibehaltung der Zerlegung in  $\tilde{\mathbf{f}}_{\perp}(\mathbf{k})$  und  $\tilde{\mathbf{f}}_{\parallel}(\mathbf{k})$  liefert

$$\mathbf{f}(\mathbf{r}) = (\hat{P}_{\perp} + \hat{P}_{\parallel}) \mathbf{f}(\mathbf{r}) = \mathbf{f}_{\perp}(\mathbf{r}) + \mathbf{f}_{\parallel}(\mathbf{r}), \quad (\text{A.4})$$

mit

$$\nabla \cdot \mathbf{f}_{\perp}(\mathbf{r}) = 0, \quad (\text{A.5a})$$

$$\nabla \times \mathbf{f}_{\parallel}(\mathbf{r}) = 0. \quad (\text{A.5b})$$

Die Zerlegung nach Gleichung (A.4) wird als Helmholtz-Zerlegung bezeichnet. Die senkrechte Komponente  $\mathbf{f}_{\perp}(\mathbf{r})$  im Ortsraum lässt mit Hilfe von den Gleichungen (A.1) und (A.3) und zweier Fouriertransformationen schreiben als

$$\mathbf{f}_{\perp}(\mathbf{r}) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \left[ 1 - \frac{\mathbf{k}}{|\mathbf{k}|^2} \left( \mathbf{k} \cdot \int \frac{d^3r'}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}'} \mathbf{f}(\mathbf{r}') \right) \right]. \quad (\text{A.6})$$

In Komponentenschreibweise nimmt Gleichung (A.6) eine etwas gutmütiger anmutende Form an,

$$\mathbf{f}_{\perp i}(\mathbf{r}) = \sum_{j=1,2,3} \int d^3x' \delta_{\perp ij}^{(3)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \mathbf{f}_j(\mathbf{r}'), \quad (\text{A.7})$$

mit der transversalen  $\delta$ -Distribution

$$\begin{aligned} \delta_{\perp ij}^{(3)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') &\stackrel{(\text{A.6})}{=} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \left( \delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{|\mathbf{k}|^2} \right) \\ &= \delta_{ij} \delta^{(3)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + \frac{1}{4\pi} \partial_i \partial_j \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}. \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

Mit Hilfe von Gleichung (A.8) lässt sich zeigen, dass

$$\begin{aligned} \sum_{i=1,2,3} \partial_i \delta_{\perp ij}^{(3)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') &= i \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \left( k_j - k_j \frac{|\mathbf{k}|^2}{|\mathbf{k}|^2} \right) \\ &= 0. \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

## A.2 Der erste Green'sche Satz für Vektorfelder

Der erste Green'sche Satz für zwei Vektorfelder  $\mathbf{F}_1(\mathbf{r})$  und  $\mathbf{F}_2(\mathbf{r})$  lautet [16]

$$\begin{aligned} \int_V d^3r \left( (\nabla \times \mathbf{F}_1(\mathbf{r})) \cdot (\nabla \times \mathbf{F}_2(\mathbf{r})) - \mathbf{F}_1(\mathbf{r}) \cdot \nabla \times (\nabla \times \mathbf{F}_2(\mathbf{r})) \right) \\ = \int_{\partial V} dA \mathbf{n} \cdot \left( \mathbf{F}_1(\mathbf{r}) \times (\nabla \times \mathbf{F}_2(\mathbf{r})) \right). \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

Auf der rechten Seite von Gleichung (A.10) ist  $\mathbf{n}$  der Normaleneinheitsvektor auf der den Rand des Volumens  $V$  begrenzenden Fläche. Im Falle angemessener Randbedingungen<sup>1</sup> für die Felder  $\mathbf{F}_1(\mathbf{r})$  und  $\mathbf{F}_2(\mathbf{r})$  verschwindet die rechte Seite von Gleichung (A.10) und der erste Green'sche Satz für Vektoren vereinfacht sich zu

$$\int_V d^3r (\nabla \times \mathbf{F}_1(\mathbf{r})) \cdot (\nabla \times \mathbf{F}_2(\mathbf{r})) = \int_V d^3r \mathbf{F}_1(\mathbf{r}) \cdot \nabla \times (\nabla \times \mathbf{F}_2(\mathbf{r})). \quad (\text{A.11})$$

Wir wenden nun Gleichung (A.11) auf Gleichung (1.25) an:

$$\begin{aligned} \frac{c_0^2}{\omega_\nu^2 V} \int_V d^3r \tilde{\mathbf{f}}_\nu(\mathbf{r}) \cdot \tilde{\mathbf{f}}_{\nu'}^*(\mathbf{r}) &= \frac{c_0^2}{\omega_\nu^2 V} \int_V d^3r (\nabla \times \mathbf{f}_\nu(\mathbf{r})) \cdot (\nabla \times \mathbf{f}_{\nu'}^*(\mathbf{r})) \\ &\stackrel{(\text{A.11})}{=} \frac{c_0^2}{\omega_\nu^2 V} \int_V d^3r \mathbf{f}_\nu(\mathbf{r}) \cdot \nabla \times (\nabla \times \mathbf{f}_{\nu'}^*(\mathbf{r})) \\ &\stackrel{(1.17)}{=} \frac{1}{V} \int_V d^3r \varepsilon(\mathbf{r}) \mathbf{f}_\nu(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{f}_{\nu'}^*(\mathbf{r}) \\ &\stackrel{(1.20)}{=} \delta_{\nu\nu'}. \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

Somit ist gezeigt, dass der Skalierungsfaktor in Gleichung (1.25) richtig gewählt ist.

---

<sup>1</sup>Siehe Fußnote 5 in Kapitel 1.2



# B ZUR TRANSFORMATION HERMITESCHER MATRIZEN

## B.1 Problemstellung

Gegeben seien ein hermitescher Operator  $\hat{O}'$  und ein Dichteoperator  $\hat{\rho}'$  in einem Hilbertraum  $\mathcal{H}_n$  der endlichen Dimension  $n$ . Der Erwartungswert  $\langle \hat{O}' \rangle_{\hat{\rho}'}$  von  $\hat{O}'$  bezüglich  $\hat{\rho}'$  ist [13]

$$\langle \hat{O}' \rangle_{\hat{\rho}'} = \text{Sp}\{\hat{O}'\hat{\rho}'\}. \quad (\text{B.1})$$

In Abschnitt 1.4.3 habe ich angedeutet, dass ich in diesem Fall immer eine unitäre Transformation  $\hat{\mathcal{U}}$  finden kann, welche

- a) die Zeitentwicklung der Erwartungswerte aller linearen Operatoren  $\hat{W}' \in \mathcal{H}_n$  bezüglich aller Dichteoperatoren  $\hat{\rho}'(t)$  nach deren Transformation invariant lässt, also

$$\langle \hat{W}(t) \rangle_{\hat{\rho}(t)} \equiv \langle \hat{\mathcal{U}}^\dagger \hat{W}' \hat{\mathcal{U}} \rangle_{\hat{\mathcal{U}}^\dagger \hat{\rho}'(t) \hat{\mathcal{U}}} = \langle \hat{W}' \rangle_{\hat{\rho}'(t)},$$

- b) und den hermiteschen Operator  $\hat{O}'$  auf einen reellen, symmetrischen Operator  $\hat{O} = \hat{\mathcal{U}}^\dagger \hat{O}' \hat{\mathcal{U}} \in \mathcal{H}_n$  abbildet, mit  $\langle i | \hat{O} | i \rangle = \langle i | \hat{O}' | i \rangle$  und  $\langle i | \hat{O} | j \rangle = |\langle i | \hat{O}' | j \rangle|$  für alle Basiszustände  $\{|i\rangle\}$  in die sowohl  $\hat{O}'$ , als auch  $\hat{O}$  entwickelt sind.

Die Existenz der unitären Transformation  $\hat{\mathcal{U}}$  zeige ich in diesem Anhang.

## B.2 Entwicklung von Operatoren durch Generatoren der $SU(n)$

Gegeben seien  $(n^2 - 1)$  Generatoren  $\hat{\lambda}_i$  einer Darstellung<sup>1</sup> der Gruppe unitärer  $(n \times n)$ -Matrizen mit komplexen Einträgen, kurz  $SU(n)$ . Für die  $\hat{\lambda}_i$  gilt [110]

$$\text{Sp}\{\hat{\lambda}_j\} = 0, \quad (\text{B.2a})$$

$$\text{Sp}\{\hat{\lambda}_j \hat{\lambda}_k\} = 2\delta_{jk}, \quad (\text{B.2b})$$

$$\hat{\lambda}_j^\dagger = \hat{\lambda}_j. \quad (\text{B.2c})$$

<sup>1</sup>Die Generatoren einer Darstellung der  $SU(n)$  müssen die Kommutatorrelation  $[\hat{\lambda}_i, \hat{\lambda}_j] = 2i \sum_{k=1}^{n^2-1} f_{ijk} \hat{\lambda}_k$ , die sog. *Lie-Algebra* der Gruppe, erfüllen. Hierbei formen die  $f_{ijk}$  einen total antisymmetrischen Tensor [110].

Es ist möglich *jeden*  $n$ -dimensionalen Operator  $\hat{A}$  durch die Einheitsmatrix  $\mathbb{1}$ , sowie die  $\hat{\lambda}_i$  auszudrücken [110]:

$$\hat{A} = \frac{1}{n} \text{Sp}\{\hat{A}\} \mathbb{1} + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{n^2-1} A_j \hat{\lambda}_j, \quad (\text{B.3})$$

mit

$$A_j = \text{Sp}\{\hat{A} \hat{\lambda}_j\}. \quad (\text{B.4})$$

Hierbei bestimmt der Koeffizientenvektor

$$\mathbf{A} = \left( A_j \right)^T \in \mathbb{C}^{(n^2-1)} \quad (\text{B.5})$$

zusammen mit der Spur des Operator  $\hat{A}$  über Gleichung (B.3) den Operator  $\hat{A}$  eindeutig. Ist  $\hat{A}$  hermitesch, so ist  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{(n^2-1)}$ .

Ich entwickle nun die hermiteschen Operatoren  $\hat{O}'$  und  $\hat{O}$  aus Abschnitt B.1 nach Gleichung (B.3) jeweils in die gleiche Basis  $\{\mathbb{1}, \hat{\lambda}_j\}$  und erhalte daraus die reellen Koeffizientenvektoren  $\mathbf{O}'$  und  $\mathbf{O}$ . Gilt nun

$$|\mathbf{O}| = |\mathbf{O}'|, \quad (\text{B.6})$$

so existiert eine  $(n^2 - 1)$ -dimensionale Drehmatrix  $\underline{\underline{U}}$  mit

$$\mathbf{O} = \underline{\underline{U}} \mathbf{O}'. \quad (\text{B.7})$$

Drehmatrizen im  $\mathbb{R}^{(n^2-1)}$  sind unitär

$$\left[ \underline{\underline{U}} \underline{\underline{U}}^T \right]_{ij} = \sum_k^{n^2} U_{ik} U_{jk} = \delta_{ij}. \quad (\text{B.8})$$

Im folgenden Abschnitt zeige ich, dass die Matrix  $\underline{\underline{U}}$  unter der Bedingung aus Gleichung (B.6) auch im  $\mathcal{H}_n$  eine unitäre Transformation beschreibt und dann die Forderung B.1a) aus erfüllt. In Abschnitt B.4 präsentiere ich dann eine Darstellung der  $\hat{\lambda}_j$ , mit deren Hilfe sich die Bedingung aus Gleichung (B.6) und schließlich auch die Forderung B.1b) erfüllen lassen.

### B.3 Die Drehmatrix $\underline{\underline{U}}$

Im Folgenden zeige ich, dass die Matrix  $\underline{\underline{U}} \in \mathbb{R}^{(n^2-1)}$  aus Gleichung (B.7) im  $\mathcal{H}_n$  eine unitäre Transformation beschreibt. Um unitär zu sein ist es für eine Transformation notwendig und hinreichend, wenn sie das Frobenius-Skalarprodukt

$$(\hat{A}', \hat{B}') \equiv \text{Sp}\{\hat{A}' \hat{B}'^\dagger\} \quad (\text{B.9})$$

zweier Operatoren  $\hat{A}'$  und  $\hat{B}'$  invariant lässt. Denn es gilt für einen unitären Operator  $\hat{U}$ :

$$\begin{aligned} (\hat{A}, \hat{B}) &= (\hat{U}^\dagger \hat{A}' \hat{U}, \hat{U}^\dagger \hat{B}' \hat{U}) \\ &= \text{Sp}\{\hat{U}^\dagger \hat{A}' \hat{U} \hat{U}^\dagger \hat{B}'^\dagger \hat{U}\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \text{Sp} \left\{ \hat{A}' \hat{U} \hat{U}^\dagger \hat{B}'^\dagger \hat{U} \hat{U}^\dagger \right\} \\
 &= \text{Sp} \{ \hat{A}' \hat{B}'^\dagger \} = (\hat{A}', \hat{B}').
 \end{aligned} \tag{B.10}$$

Dabei habe ich im zweiten Schritt verwendet, dass sich die Spur des Produkts mehrerer quadratischer Matrizen bei einer zyklischen Vertauschung der Matrizen nicht ändert. Setzt man in Gleichung (B.10) den Operator  $\hat{B} = \mathbb{1}$ , so ergibt sich, dass

$$(\hat{A}, \mathbb{1}) = \text{Sp} \{ \hat{A} \} = \text{Sp} \{ \hat{A}' \},$$

und somit die Spur eines Operators unter einer unitären Transformation invariant bleibt.

Es seien nun zwei Operatoren  $\hat{A}$  und  $\hat{B}$  Elemente des  $\mathcal{H}_n$  und über die Drehmatrix  $\underline{\underline{U}}$  mit zwei Operatoren  $\hat{A}'$  und  $\hat{B}'$  aus dem gleichen Hilbertraum verknüpft, das heißt wenn diese Operatoren entsprechend den Gleichungen (B.3) bis (B.5) entwickelt werden, gilt für ihre Koeffizientenvektoren  $\mathbf{A}$  und  $\mathbf{B}$

$$\mathbf{A} = \underline{\underline{U}} \mathbf{A}', \tag{B.11a}$$

$$\mathbf{B} = \underline{\underline{U}} \mathbf{B}'. \tag{B.11b}$$

Dann ergibt sich für deren Frobenius-Skalarprodukt

$$\begin{aligned}
 (\hat{A}, \hat{B}) &\stackrel{(B.3)(B.2c)}{=} \text{Sp} \left\{ \left( \frac{1}{n} \text{Sp} \{ \hat{A}' \} \mathbb{1} + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{n^2-1} U_{ij} A'_j \hat{\lambda}_i \right) \left( \frac{1}{n} \text{Sp} \{ \hat{B}' \} \mathbb{1} + \frac{1}{2} \sum_{k,l=1}^{n^2-1} U_{kl} B'_l{}^* \hat{\lambda}_k \right) \right\} \\
 &\stackrel{(B.2a)(B.2b)}{=} \frac{1}{n} \text{Sp} \{ A' \} \text{Sp} \{ B'^\dagger \} + \frac{1}{2} \sum_{i,j,l=1}^{n^2-1} U_{ij} U_{il} A'_j B'_l{}^* \\
 &\stackrel{(B.8)}{=} \frac{1}{n} \text{Sp} \{ A' \} \text{Sp} \{ B'^\dagger \} + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{n^2-1} A'_j B'_j{}^* \\
 &\stackrel{(B.2a)}{=} \frac{1}{n} \text{Sp} \{ A' \} \text{Sp} \{ B'^\dagger \} + \frac{1}{4} \sum_{i,j=1}^{n^2-1} A'_i \hat{\lambda}_i B'_j{}^* \hat{\lambda}_j \\
 &= \text{Sp} \left\{ \left( \frac{1}{n} \text{Sp} \{ \hat{A}' \} \mathbb{1} + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n^2-1} A'_i \hat{\lambda}_i \right) \left( \frac{1}{n} \text{Sp} \{ \hat{B}' \} \mathbb{1} + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{n^2-1} B'_j{}^* \hat{\lambda}_j \right) \right\} \\
 &\stackrel{(B.3)(B.2c)}{=} (\hat{A}', \hat{B}') \equiv (\hat{U}^\dagger \hat{A}' \hat{U}, \hat{U}^\dagger \hat{B}'^\dagger \hat{U}).
 \end{aligned} \tag{B.12}$$

Somit ist gezeigt, dass die Matrix  $\underline{\underline{U}} \in \mathbb{R}^{(n^2-1)}$  mit den Gleichungen (B.11) und (B.3) bis (B.5) auch im  $\mathcal{H}_n$  eine unitäre Transformation beschreibt. Gleichzeitig ist somit auch die Forderung B.1a) erfüllt, da

$$\langle \hat{W}(t) \rangle_{\hat{\rho}(t)} = (\hat{W}, \hat{\rho}(t)) \stackrel{(B.12)}{=} (\hat{W}', \hat{\rho}'(t)) = \langle \hat{W}'(t) \rangle_{\hat{\rho}'(t)}. \tag{B.13}$$

Zudem ergibt sich, dass

$$\text{Sp}\{\hat{\rho}^2\} = (\hat{\rho}, \hat{\rho}) \stackrel{\text{(B.12)}}{=} (\hat{\rho}', \hat{\rho}') = \text{Sp}\{\hat{\rho}'^2\}. \quad (\text{B.14})$$

Die Spur des Quadrats von Dichteoperatoren ist also unter der Transformation durch  $\underline{U}$  erhalten. Dies bedeutet, dass die Transformation somit *reine Zustände auf reine Zustände* und *gemischte Zustände auf gemischte Zustände* abbildet [13].

## B.4 Die verallgemeinerten Gell-Mann-Matrizen als Generatoren einer Darstellung der $\text{SU}(n)$

Generatoren einer speziellen Darstellung der  $\text{SU}(n)$  sind die  $(n^2 - 1)$  *verallgemeinerten Gell-Mann-Matrizen (VGM)* [111, 112]. Diese sind gegeben durch

$$\{\hat{\lambda}_i\} = \{\hat{\Lambda}_s^{jk}, \hat{\Lambda}_a^{jk}, \hat{\Lambda}_d^l\}, \quad \text{wobei} \quad (\text{B.15a})$$

$$\hat{\Lambda}_s^{jk} = |j\rangle\langle k| + |k\rangle\langle j|, \quad 1 \leq j < k \leq n \quad (\text{symm. VGM}), \quad (\text{B.15b})$$

$$\hat{\Lambda}_a^{jk} = -i|j\rangle\langle k| + i|k\rangle\langle j|, \quad 1 \leq j < k \leq n \quad (\text{antisymm. VGM}), \quad (\text{B.15c})$$

$$\hat{\Lambda}_d^l = \sqrt{\frac{2}{l(l+1)}} \sum_{j=1}^l (|j\rangle\langle j| - l|l+1\rangle\langle l+1|), \quad 1 \leq l \leq n-1 \quad (\text{diag. VGM}). \quad (\text{B.15d})$$

In der durch die VGM und  $\hat{\lambda}_0$  aufgespannten Operatorbasis sind die Entwicklungskoeffizienten von  $\hat{O}'$ , die proportional zu den symmetrischen VGM  $\hat{\Lambda}_s^{jk}$  aus Gleichung (B.15b) sind, die Realteile von  $\langle i|\hat{O}'|j\rangle$ . Die Imaginärteile von  $\langle i|\hat{O}'|j\rangle$  stellen die Entwicklungskoeffizienten dar, die proportional zu den antisymmetrischen VGM  $\hat{\Lambda}_a^{jk}$  aus Gleichung (B.15c) sind. Um Forderung B.1b) zu erfüllen, muss man in der Basis der VGM die Matrix  $\underline{U}$  so wählen, dass die Komponenten von  $\mathbf{O}$  bezüglich der  $\hat{\Lambda}_a^{jk}$  verschwinden. Dies ist durch eine reine Drehung im  $\mathbb{R}^{(n^2-1)}$  möglich, so dass  $\underline{U}$  eine Drehmatrix sein muss und  $\mathbf{O}'$  und  $\mathbf{O}$  die Bedingung aus Gleichung (B.6) erfüllt.

Die Komponenten von  $\mathbf{O}'$  und  $\mathbf{O}$ , welche den Anteil der diagonalen VGM aus Gleichung (B.15d) an den Operatoren  $\hat{O}'$  und  $\hat{O}$  beschreiben, sind die reellen Diagonalelemente von  $\hat{O}'$  und  $\hat{O}$ . Da die Matrix  $\underline{U}$ , wie oben beschrieben, nur im  $\mathbb{R}^{(n(n-1))}$  wirkt, der durch die symmetrischen und antisymmetrischen VGM aufgespannt wird, bleiben die Diagonalen der transformierten Operatoren invariant. Somit existiert eine unitären Transformation  $\hat{\mathcal{U}}$ , die die Forderungen B.1a) und B.1b) erfüllt. *Q.E.D.!*

# C ALGORITHMEN ZU DEN PRODUKTEN $\hat{H} |\Psi\rangle_1$ UND $\hat{H} |\Psi\rangle_2$

## C.1 Wirkung des Hamiltonoperators auf Zustände mit $\mathcal{C} = 1$ und $\mathcal{C} = 2$

Im Folgenden gebe ich die Zustände an, die sich ergeben, wenn der Hamiltonoperator  $\hat{H}$  aus Gleichung (2.45) auf die Zustände  $|\Psi\rangle_1$  und  $|\Psi\rangle_2$  aus den Gleichungen (2.37) und (2.40) angewendet wird. Diese habe ich benötigt, um das in Abschnitt 2.2.3 beschriebene Krylov-Unterraum-Verfahren zur Zeitentwicklung für WQED Systeme zu implementieren. Die resultierenden Zustände lauten

$$\begin{aligned} \hat{H} |\Psi\rangle_1 = & \sum_{x=x_1}^{x_N} \sum_{\{|p\rangle\}_0} \left( \sum_{x'}^{x_N} J_{xx'} \phi_p^{x'} + E_p \phi_p^x + \sum_{\{|r\rangle\}_1} V_{pr}^x \phi_r^x \right) \hat{a}_x^\dagger |\mathbf{0}, p\rangle \\ & + \sum_{\{|r\rangle\}_1} \left( E_r \phi_r + \sum_{x=x_1}^{x_N} \sum_{\{|p\rangle\}_0} V_{rp}^x \phi_p^x \right) |\mathbf{0}, r\rangle, \end{aligned} \quad (\text{C.1})$$

$$\begin{aligned} \hat{H} |\Psi\rangle_2 = & \sum_{\substack{x=x_1 \\ x'=x}}^{x_N} \sum_{\{|p\rangle\}_0} \left( \mathcal{Q}_{xx'} \left( \sum_{y=x_1}^{x'} \mathcal{Z}_{x'y} J_{xy} \phi_p^{yx'} \right. \right. \\ & + \sum_{y=x_1}^x \mathcal{Z}_{xy} J_{x'y} \phi_p^{yx} \\ & + \sum_{y=x'}^{x_N} \mathcal{Z}_{x'y} J_{xy} \phi_p^{x'y} \\ & \left. \left. + \sum_{y=x}^{x_N} \mathcal{Z}_{xy} J_{x'y} \phi_p^{xy} \right) \right. \\ & + E_p \phi_p^{xx'} \\ & \left. + \sum_{\{|r\rangle\}_1} \mathcal{Q}_{xx'} \left( V_{pr}^{x'} \phi_r^x + V_{pr}^x \phi_r^{x'} \right) \right) \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_{x'}^\dagger |\mathbf{0}, p\rangle \\ & + \sum_{x=x_1}^{x_N} \sum_{\{|r\rangle\}_1} \left( \sum_{x'}^{x_N} J_{xx'} \phi_r^{x'} \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & + E_r \phi_r^x \\
 & + \sum_{\{|p\rangle\}_0} \left( \sum_{x'=x_1}^x \mathcal{Z}_{xx'} V_{rp}^{x'} \phi_p^{x'x} \right. \\
 & \quad \left. + \sum_{x'=x}^{x_N} \mathcal{Z}_{xx'} V_{rp}^{x'} \phi_p^{xx'} \right) \\
 & + \sum_{\{|s\rangle\}_2} V_{rs}^x \phi_s \Big) \hat{a}_x^\dagger |\mathbf{0}, r\rangle \\
 & + \sum_{\{|s\rangle\}_2} \left( E_s \phi_s + \sum_{x=x_1}^{x_N} \sum_{\{|r\rangle\}_1} V_{sr}^x \phi_r^x \right) |\mathbf{0}, s\rangle, \tag{C.2}
 \end{aligned}$$

mit den Hilfsgrößen

$$\mathcal{Z}_{xx'} = 1 + \delta_{xx'} \frac{1 - \sqrt{2}}{\sqrt{2}}, \tag{C.3a}$$

$$\mathcal{Q}_{xx'} = 1 + \delta_{xx'} \frac{1 - 2}{2}. \tag{C.3b}$$

## C.2 Die resultierende Algorithmen zum Matrix-Vektor-Produkt

In diesem Abschnitt gebe ich die Algorithmen an, die sich mit Hilfe der Gleichungen (C.1) und (C.2) zur Berechnung der Matrix-Vektor-Produkte  $\underline{\underline{H}}\Psi_1$  und  $\underline{\underline{H}}\Psi_2$  mit  $\Psi_1$  und  $\Psi_2$  aus den Gleichungen (2.39) und (2.43) ergeben. Die Matrix  $\underline{\underline{H}}$  ist die den Hamiltonoperator  $\hat{H}$  aus Gleichung (2.45) im  $\mathbb{C}^n$  repräsentierende Matrix. Die Größe  $n$  die Dimension des betrachteten Hilbertraumes. Wie ich in Abschnitt 2.3.5 beschrieben habe, habe ich diese Algorithmen verwendet, um das in Abschnitt 2.2.3 erläuterte Krylov-Unterraum-Verfahren zur Zeitentwicklung für WQED Systeme zu implementieren.

Krylov-Unterraum-Verfahren sind im Falle dünnbesetzter Matrizen effizient, siehe Abschnitt 2.2.2. Ist die Matrix  $\underline{\underline{H}}$  dünnbesetzt, ist dies äquivalent zu der Aussage, dass die meisten Koeffizienten  $J_{xx'}$ ,  $E_l$ ,  $V_{ml}^x$  und  $V_{lm}^x$  im Hamiltonoperator  $\hat{H}$  aus Gleichung (2.45) verschwinden. Es hat sich bei der Implementierung als effizient erwiesen, in den Algorithmen zur Berechnung der Matrix-Vektor-Produkte in einer äußeren Schleife über diese Koeffizienten zu iterieren und dann die entsprechenden Einträge in den Vektoren  $\underline{\underline{H}}\Psi_j$  und  $\Psi_j$  mit  $j \in \{1, 2\}$  miteinander über die Gleichungen (C.1) und (C.2) zu verknüpfen. Die vollständige Implementierung von  $\underline{\underline{H}}\Psi_1$  ist durch Algorithmus C.1 gegeben.

Bei der Implementierung von  $\underline{\underline{H}}\Psi_2$  ist zu berücksichtigen, dass  $(\hat{a}_x^\dagger)^2|\mathbf{0}\rangle = \sqrt{2}|\mathbf{2}_x\rangle$ . Zur besseren Übersicht habe ich den Algorithmus zur Berechnung von  $\underline{\underline{H}}\Psi_2$  aufgeteilt: Algorithmus C.2 zeigt analog zu den ersten Zeilen von Algorithmus C.1 die Initialisierung des resultierenden Vektors  $\Psi_{\text{aus}}$  als Nullvektor. Es folgen die Algorithmen C.3 bis C.5, die jeweils die Implementierungen von  $\underline{\underline{H}}_{\text{EM}}\Psi_2$ ,  $\underline{\underline{H}}_{\text{A}}\Psi_2$  und  $\underline{\underline{H}}_{\text{LM}}\Psi_2$  zeigen.

```

eingabe :  $\Psi_1^{\text{ein}}$ 
ausgabe :  $\Psi_1^{\text{aus}} := \underline{\underline{H}}\Psi_1^{\text{ein}}$ 
 $\Psi_1^{\text{aus}} := 0$ ;
für  $J_{x_i x_j} \in \{J_{xx'}\}$  tue
  | für  $p = 1$  bis  $P$  tue
    |  $(\Psi_1^{\text{aus}})_{i+N(p-1)} += J_{x_i x_j} (\Psi_1^{\text{ein}})_{j+N(p-1)}$ ;
    ende
  ende
für  $E_i \in \{E_l\}$  tue
  | wenn  $v_i == 0$  dann
    | für  $j = 1$  bis  $N$  tue
      |  $(\Psi_1^{\text{aus}})_{j+N(i-1)} += E_i (\Psi_1^{\text{ein}})_{j+N(i-1)}$ ;
      ende
    sonst
      |  $(\Psi_1^{\text{aus}})_{NP+i} += E_i (\Psi_1^{\text{ein}})_{NP+i}$ ;
    ende
  ende
für  $V_{p_j r_l}^{x_i} \in \{V_{pr}^{x'}\}$  tue
  |  $(\Psi_1^{\text{aus}})_{i+N(j-1)} += V_{p_j r_l}^{x_i} (\Psi_1^{\text{ein}})_{NP+l}$ ;
ende
für  $V_{r_j p_l}^{x_i} \in \{V_{rp}^{x'}\}$  tue
  |  $(\Psi_1^{\text{aus}})_{NP+j} += V_{r_j p_l}^{x_i} (\Psi_1^{\text{ein}})_{i+N(l-1)}$ ;
ende

```

Algorithmus C.1 : Algorithmus zur Berechnung von  $\underline{\underline{H}}\Psi_1$  als Pseudoquelltext

```

eingabe :  $\Psi_2^{\text{ein}}$ 
ausgabe :  $\Psi_2^{\text{aus}} := \underline{\underline{H}}\Psi_2^{\text{ein}}$ 
 $\Psi_2^{\text{aus}} := 0$ ;

```

Algorithmus C.2 : Algorithmus zur Berechnung von  $\underline{\underline{H}}\Psi_2$ : Initialisierung als Pseudoquelltext

```

für  $J_{x_i x_j} \in \{J_{xx'}\}$  tue
  für  $p = 1$  bis  $P$  tue
    für  $l = 1$  bis  $j - 1$  tue
      wenn  $l < i$  dann
         $(\Psi_2^{\text{aus}})_{\frac{N(N+1)(p-1)+2l+i(i-1)}{2}} += J_{x_i x_j}(\Psi_2^{\text{ein}})_{\frac{N(N+1)(p-1)+2l+j(j-1)}{2}};$ 
      sonst wenn  $l > i$  dann
         $(\Psi_2^{\text{aus}})_{\frac{N(N+1)(p-1)+2l+l(l-1)}{2}} += J_{x_i x_j}(\Psi_2^{\text{ein}})_{\frac{N(N+1)(p-1)+2l+j(j-1)}{2}};$ 
      sonst wenn  $l == i$  dann
         $(\Psi_2^{\text{aus}})_{\frac{N(N+1)(p-1)+2l+l(l-1)}{2}} += \sqrt{2}J_{x_i x_j}(\Psi_2^{\text{ein}})_{\frac{N(N+1)(p-1)+2l+j(j-1)}{2}};$ 
      ende
    ende
    für  $l = j$  bis  $N$  tue
      wenn  $l < i$  dann
        wenn  $l \neq j$  dann
           $(\Psi_2^{\text{aus}})_{\frac{N(N+1)(p-1)+2l+i(i-1)}{2}} += J_{x_i x_j}(\Psi_2^{\text{ein}})_{\frac{N(N+1)(p-1)+2j+l(l-1)}{2}};$ 
        sonst
           $(\Psi_2^{\text{aus}})_{\frac{N(N+1)(p-1)+2l+i(i-1)}{2}} += \sqrt{2}J_{x_i x_j}(\Psi_2^{\text{ein}})_{\frac{N(N+1)(p-1)+2l+l(l-1)}{2}};$ 
        ende
      sonst wenn  $l > i$  dann
        wenn  $l \neq j$  dann
           $(\Psi_2^{\text{aus}})_{\frac{N(N+1)(p-1)+2l+l(l-1)}{2}} += J_{x_i x_j}(\Psi_2^{\text{ein}})_{\frac{N(N+1)(p-1)+2j+l(l-1)}{2}};$ 
        sonst
           $(\Psi_2^{\text{aus}})_{\frac{N(N+1)(p-1)+2l+l(l-1)}{2}} += \sqrt{2}J_{x_i x_j}(\Psi_2^{\text{ein}})_{\frac{N(N+1)(p-1)+2l+l(l-1)}{2}};$ 
        ende
      sonst wenn  $l == i$  dann
        wenn  $l \neq j$  dann
           $(\Psi_2^{\text{aus}})_{\frac{N(N+1)(p-1)+2l+l(l-1)}{2}} += \sqrt{2}J_{x_i x_j}(\Psi_2^{\text{ein}})_{\frac{N(N+1)(p-1)+2j+l(l-1)}{2}};$ 
        sonst
           $(\Psi_2^{\text{aus}})_{\frac{N(N+1)(p-1)+2l+l(l-1)}{2}} += 2J_{x_i x_j}(\Psi_2^{\text{ein}})_{\frac{N(N+1)(p-1)+2l+l(l-1)}{2}};$ 
        ende
      ende
    ende
  ende
  für  $r = 1$  bis  $R$  tue
     $(\Psi_2^{\text{aus}})_{\frac{N(N+1)P}{2}+i+N(r-1)} += J_{x_i x_j}(\Psi_2^{\text{ein}})_{\frac{N(N+1)P}{2}+j+N(r-1)};$ 
  ende
ende

```

Algorithmus C.3 : Algorithmus zur Berechnung von  $\underline{\underline{H}}\Psi_2$ : Berechnung von  $\underline{\underline{H}}_{\text{EM}}\Psi_2$  als Pseudoquelltext



```

für  $E_i \in \{E_l\}$  tue
  wenn  $v_i == 0$  dann
    für  $j = 1$  bis  $N$  tue
      für  $k = j$  bis  $N$  tue
         $(\Psi_2^{\text{aus}})_{\frac{N(N+1)(i-1)+2j+k(k-1)}{2}} += E_i (\Psi_2^{\text{ein}})_{\frac{N(N+1)(i-1)+2j+k(k-1)}{2}};$ 
      ende
    ende
  sonst wenn  $v_i == 1$  dann
    für  $j = 1$  bis  $N$  tue
       $(\Psi_2^{\text{aus}})_{\frac{N(N+1)P}{2}+j+N(i-1)} += E_i (\Psi_2^{\text{ein}})_{\frac{N(N+1)P}{2}+j+N(i-1)};$ 
    ende
  sonst wenn  $v_i == 2$  dann
     $(\Psi_2^{\text{aus}})_{\frac{N(N+1)P}{2}+NR+i} += E_i (\Psi_2^{\text{ein}})_{\frac{N(N+1)P}{2}+NR+i};$ 
  ende
ende

```

Algorithmus C.4 : Algorithmus zur Berechnung von  $\underline{\underline{H}}\Psi_2$ : Berechnung von  $\underline{\underline{H}}_A\Psi_2$  als Pseudoquelltext

```

für  $V_{p_j r_l}^{x_i} \in \{V_{pr}^{x'}\}$  tue
  für  $k = 1$  bis  $i - 1$  tue
     $(\Psi_2^{\text{aus}})^{\frac{N(N+1)(j-1)+2k+i(i-1)}{2}} += V_{p_j r_l}^{x_i} (\Psi_2^{\text{ein}})^{\frac{N(N+1)P}{2}+k+N(l-1)};$ 
  ende
   $(\Psi_2^{\text{aus}})^{\frac{N(N+1)(j-1)+2i+i(i-1)}{2}} += \sqrt{2} V_{p_j r_l}^{x_i} (\Psi_2^{\text{ein}})^{\frac{N(N+1)P}{2}+i+N(l-1)};$ 
  für  $k = i + 1$  bis  $N$  tue
     $(\Psi_2^{\text{aus}})^{\frac{N(N+1)(j-1)+2i+k(k-1)}{2}} += V_{p_j r_l}^{x_i} (\Psi_2^{\text{ein}})^{\frac{N(N+1)P}{2}+k+N(l-1)};$ 
  ende
ende
für  $V_{r_j p_l}^{x_i} \in \{V_{rp}^{x'}\}$  tue
  für  $k = 1$  bis  $i - 1$  tue
     $(\Psi_2^{\text{aus}})^{\frac{N(N+1)P}{2}+k+N(j-1)} += V_{r_j p_l}^{x_i} (\Psi_2^{\text{ein}})^{\frac{N(N+1)(l-1)+2k+i(i-1)}{2}};$ 
  ende
   $(\Psi_2^{\text{aus}})^{\frac{N(N+1)P}{2}+k+N(j-1)} += \sqrt{2} V_{r_j p_l}^{x_i} (\Psi_2^{\text{ein}})^{\frac{N(N+1)(l-1)+2i+i(i-1)}{2}};$ 
  für  $k = i + 1$  bis  $N$  tue
     $(\Psi_2^{\text{aus}})^{\frac{N(N+1)P}{2}+k+N(j-1)} += V_{r_j p_l}^{x_i} (\Psi_2^{\text{ein}})^{\frac{N(N+1)(l-1)+2i+k(k-1)}{2}};$ 
  ende
ende
für  $V_{r_j s_l}^{x_i} \in \{V_{rs}^{x'}\}$  tue
   $(\Psi_2^{\text{aus}})^{\frac{N(N+1)P}{2}+i+N(j-1)} += V_{r_j s_l}^{x_i} (\Psi_2^{\text{ein}})^{\frac{N(N+1)P}{2}+NR+l};$ 
ende
für  $V_{s_j r_l}^{x_i} \in \{V_{sr}^{x'}\}$  tue
   $(\Psi_2^{\text{aus}})^{\frac{N(N+1)P}{2}+NR+j} += V_{s_j r_l}^{x_i} (\Psi_2^{\text{ein}})^{\frac{N(N+1)P}{2}+i+N(l-1)};$ 
ende

```

Algorithmus C.5 : Algorithmus zur Berechnung von  $\underline{\underline{H}}\Psi_2$ : Berechnung von  $\underline{\underline{H}}_{\text{LM}}\Psi_2$  als Pseudoquelltext

# PUBLIKATIONEN & VERSCHIEDENES

## Publikationen im Rahmen dieser Dissertation

- C. Martens, P. Longo und K. Busch, "Photon transport in one-dimensional systems coupled to three-level quantum impurities", *New. J. Phys.* **15**, 083019 (2013).
- C. Martens und K. Busch, "The Schmidt decomposition and entanglement in the context of waveguide quantum electrodynamics", (in Vorbereitung).
- T. Sproll, C. Martens, M. P. Schneider, F. Intravaia und K. Busch, "Atomic population transfer in integrated 1-D photonic structures", (in Vorbereitung).

## Weitere Publikationen

- M. P. Schneider, T. Sproll, C. Martens und K. Busch, "Tunability of a one-dimensional waveguide with an embedded two-level system subjected to few photon wavepackets", (in Vorbereitung).
- M. P. Schneider, C. Martens, T. Sproll und K. Busch, "Decay properties of an atom coupled to a disordered waveguide", (in Vorbereitung).

## Betreute Abschlussarbeiten

- R. Mohrhardt, *Untersuchung der Streueigenschaften einzelner Photonen am gebundenen Atom-Photon-Zustand in eindimensionalen Wellenleitern*, Diplomarbeit (Humboldt-Universität zu Berlin, 2015).

## Preise

- Konferenzpreis des besten Posters:  
C. Martens, P. Longo und K. Busch, "Photon transport in one-dimensional systems coupled to three-level quantum impurities", *TaCoNa-Photonics 2012*, (Bad Honnef, 2012).



# DANKSAGUNG

An düsse Stell will ik Dank seggen to denjienige Lüüd, ohne jümmer Help ik nech so wiet komen weer düsse Wark uptosetten un as Doktorarbeit intogeeven. Mien afsünnerliche Dank gellt Prof. Kurt Busch, de mi de Gelegenheit geev in de *AG TO&P* op een aktuelle un bannig opregende Rebeet to forschen. Ik dank Prof. Oliver Benson un Prof. Jens Förstner dor för, paraat to sien mien Wark to beogen.

Wiederhen bedank ik mi bi all mien Kollegen för Raat, Hölp un Sellschop an de Arbeitsplatz in den aflopenden (binah) veer John. To'n Afschluss dank ik mien Familie un all mien Frünnen: Jüm sünd super!



# LITERATUR

1. M. O. Scully und M. S. Zubairy, *Quantum Optics* (Cambridge University Press, Cambridge, 1997).
2. A. Einstein, “Über einen die Erzeugung und Verwandlung des Lichtes betreffenden heuristischen Gesichtspunkt”, *Ann. Phys.* **322**, 132 (1905).
3. <<http://tinyurl.com/JahrhundertDesPhotons>>. Abgerufen am 6. Oktober 2015 um 21.09 Uhr.
4. C. M. Caves, “Quantum information science: Emerging no more”, arXiv:1302.1864v2 [quant-ph] (2013).
5. B. Schumacher, “Quantum coding”, *Phys. Rev. A* **51**, 2738 (1995).
6. Z. Zhou, S.-I. Chu und S. Han, “Quantum computing with superconducting devices: A three-level SQUID qubit”, *Phys. Rev. B* **66**, 054527 (2002).
7. H. J. Kimble, “The quantum internet”, *Nature* **453**, 1023 (2008).
8. J. D. Jackson, *Classical Electrodynamics* (Wiley, New York, 1999).
9. R. J. Glauber und M. Lewenstein, “Quantum optics of dielectric media”, *Phys. Rev. A* **43**, 467 (1991).
10. <<http://refractiveindex.info/?shelf=glass&book=BK7&page=SCHOTT>>. Abgerufen am 18. August 2015 um 16.50 Uhr.
11. *The International System of Units (SI)* (Organisation intergouvernementale de la Convention du Mètre, Bureau international des poids et mesures, Paris, 2006).
12. W. Greiner und J. Reinhardt, *Theoretische Physik 7a: Feldquantisierung* (Deutsch, Thun, 1993).
13. J. J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics* (Addison-Wesley, Boston, 2008).
14. G. Kweon und N. Lawandy, “Quantum electrodynamics in photonic crystals”, *Opt. Commun.* **118**, 388 (1995).
15. J. de Rosny, G. Lerosey, A. Tourin und M. Fink, *Modeling and Computations in Electromagnetics* (Hrsg. H. Ammari) Kap. Time Reversal of Electromagnetic Waves (Springer, Berlin, 2008).
16. C.-T. Tai, *Dyadic Green Functions in Electromagnetic Theory* (IEEE Press, Piscataway, 1994).
17. P. W. Milonni, *The Quantum Vacuum: an Introduction to Quantum Electrodynamics* (Academic Press, Boston, 1994).
18. F. Schwabl, *Quantenmechanik für Fortgeschrittene (QM II)* (Springer, Berlin, 2008).
19. I. Buluta, S. Ashhab und F. Nori, “Natural and artificial atoms for quantum computation”, *Rep. Prog. Phys.* **74**, 104401 (2011).

20. A. Ekimov, A. Efros und A. Onushchenko, “Quantum size effect in semiconductor microcrystals”, *Solid State Commun.* **56**, 921 (1985).
21. Y. Liu, J. Q. You, L. F. Wei, C. P. Sun und F. Nori, “Optical selection rules and phase-dependent adiabatic state control in a superconducting quantum circuit”, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 087001 (2005).
22. C. Cohen-Tannoudji, J. Dupont-Roc und G. Grynberg, *Photons and Atoms: Introduction to Quantum Electrodynamics* (Wiley, New York, 1989).
23. L. Allen und J. H. Eberly, *Optical Resonance and Two-level Atoms* (Dover Publications, New York, 1987).
24. C. C. Gerry und P. L. Knight, *Introductory Quantum Optics* (Cambridge University Press, Cambridge, 2005).
25. T. Niemczyk, F. Deppe, H. Huebl, E. P. Menzel, F. Hocke, M. J. Schwarz, J. J. Garcia-Ripoll, D. Zueco, T. Hümmer, E. Solano, A. Marx und R. Gross, “Circuit quantum electrodynamics in the ultrastrong-coupling regime”, *Nat. Phys.* **6**, 772 (2010).
26. J. D. Joannopoulos, *Photonic Crystals: Molding the Flow of Light* (Princeton University Press, Princeton, 2008).
27. R. Gross, A. Marx und D. Einzel, *Festkörperphysik* (Oldenbourg Verlag, München, 2014).
28. D. Hermann, *Wannier-Function based Scattering-Matrix Formalism for Photonic Crystal Circuitry*. Dissertation (Universität Karlsruhe (TH), 2008).
29. K. Busch, G. von Freymann, S. Linden, S. Mingaleev, L. Tkeshelashvili und M. Wegener, “Periodic nanostructures for photonics”, *Phys. Rep.* **444**, 101 (2007).
30. K. Busch, C. Blum, A. M. Graham, D. Hermann, M. Köhl, P. Mack und C. Wolff, “The photonic Wannier function approach to photonic crystal simulations: status and perspectives”, *J. Mod. Opt.* **58**, 365 (2011).
31. S. M. Vuković, N. B. Aleksić und D. V. Timotijević, “Guided modes in left-handed waveguides”, *Opt. Commun.* **281**, 1500 (2008).
32. A. Yariv, Y. Xu, R. K. Lee und A. Scherer, “Coupled-resonator optical waveguide: a proposal and analysis”, *Opt. Lett.* **24**, 711 (1999).
33. M. Notomi, E. Kuramochi und T. Tanabe, “Large-scale arrays of ultrahigh-Q coupled nanocavities”, *Nature Photon.* **2**, 741 (2008).
34. E. Kuramochi, T. Tanabe und M. Notomi, “Silicon-based large-scale photonic crystal nanocavity arrays for slow-light applications”, *NTT Technical Review* **8**, 1 (2010).
35. “IEEE standard for floating-point arithmetic”, *IEEE Std 754-2008* (2008).
36. E. Anderson, Z. Bai, C. Bischof, S. Blackford, J. Demmel, J. Dongarra, J. Du Croz, A. Greenbaum, S. Hammarling, A. McKenney und D. Sorensen, *LAPACK Users’ Guide* (Society for Industrial und Applied Mathematics, Philadelphia, 1999).
37. Y. Saad, *Numerical Methods for Large Eigenvalue Problems* (SIAM, Philadelphia, 2011).
38. Y. Saad, *Iterative Methods for Sparse Linear Systems* (SIAM, Philadelphia, 2003).



39. Y. Saad, "Analysis of some Krylov subspace approximations to the matrix exponential operator", SIAM J. Numer. Anal. **29**, 209 (1992).
40. E. Gallopoulos und Y. Saad, "Efficient solution of parabolic equations by Krylov approximation methods", SIAM J. Sci. Comput. **13**, 1236 (1992).
41. R. B. Sidje, "Expokit: A software package for computing matrix exponentials", ACM Trans. Math. Softw. **24**, 130 (1998).
42. J. Niegemann, L. Tkeshelashvili und K. Busch, "Higher-order time-domain simulations of Maxwell's equations using Krylov-subspace methods", J. Comput. Theor. Nanosci. **4**, 627 (2007).
43. M. Hochbruck und C. Lubich, "On Krylov subspace approximations to the matrix exponential operator", SIAM J. Numer. Anal. **34**, 1911 (1997).
44. C. Moler und C. V. Loan, "Nineteen dubious ways to compute the exponential of a matrix, twenty-five years later", SIAM Review **45**, 3 (2003).
45. K. Busch, J. Niegemann, M. Pototschnig und L. Tkeshelashvili, "A Krylov-subspace based solver for the linear and nonlinear Maxwell equations", Phys. Status Solidi B **244**, 3479 (2007).
46. P. Longo, *Waveguide Quantum Optics: A Wave-Function Based Approach*. Dissertation (Karlsruher Institut für Technologie (KIT), 2012).
47. P. Furlan, *Das gelbe Rechenbuch 1: Lineare Algebra, Differentialrechnung* (Furlan, Dortmund, 2010).
48. R. L. Burden und J. D. Faires, *Numerical analysis* (Brooks/Cole-Thomson Learning, Pacific Grove, 2001).
49. <<http://www.isocpp.org>>. Abgerufen am 7. Oktober 2015 um 11.22 Uhr.
50. <<http://www.caam.rice.edu/software/ARPACK/>>. Abgerufen am 7. Oktober 2015 um 11.22 Uhr.
51. <<http://www.fftw.org/>>. Abgerufen am 7. Oktober 2015 um 11.23 Uhr.
52. <<https://software.intel.com/en-us/articles/intel-math-kernel-library-documentation>>. Abgerufen am 7. Oktober 2015 um 11.24 Uhr.
53. <<http://www.grinninglizard.com/tinyxml/>>. Abgerufen am 7. Oktober 2015 um 11.25 Uhr.
54. <<https://www.hdfgroup.org/HDF5/>>. Abgerufen am 7. Oktober 2015 um 11.26 Uhr.
55. <<http://de.mathworks.com/products/matlab/>>. Abgerufen am 7. Oktober 2015 um 11.26 Uhr.
56. R. Mohrhardt, *Untersuchung der Streueigenschaften einzelner Photonen am gebundenen Atom-Photon-Zustand in eindimensionalen Wellenleitern* Diplomarbeit (Humboldt-Universität zu Berlin, 2015).
57. M. P. Schneider, *A theoretical framework for waveguide quantum electrodynamics and its application in disordered systems* Dissertation (Humboldt Universität zu Berlin, 2015).
58. C. Martens, P. Longo und K. Busch, "Photon transport in one-dimensional systems coupled to three-level quantum impurities", New J. Phys. **15**, 083019 (2013).

59. J. T. Shen und S. Fan, “Coherent photon transport from spontaneous emission in one-dimensional waveguides”, *Opt. Lett.* **30**, 2001 (2005).
60. J.-T. Shen und S. Fan, “Coherent single photon transport in a one-dimensional waveguide coupled with superconducting quantum bits”, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 213001 (2005).
61. L. Zhou, Z. R. Gong, Y.-x. Liu, C. P. Sun und F. Nori, “Controllable scattering of a single photon inside a one-dimensional resonator waveguide”, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 100501 (2008).
62. P. Longo, P. Schmitteckert und K. Busch, “Dynamics of photon transport through quantum impurities in dispersion-engineered one-dimensional systems”, *J. Opt. A* **11**, 114009 (2009).
63. J. T. Shen und S. Fan, “Strongly correlated two-photon transport in a one-dimensional waveguide coupled to a two-level system”, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 153003 (2007).
64. J. T. Shen und S. Fan, “Strongly correlated multiparticle transport in one dimension through a quantum impurity”, *Phys. Rev. A* **76**, 062709 (2007).
65. H. Zheng, D. J. Gauthier und H. U. Baranger, “Waveguide QED: Many-body bound-state effects in coherent and Fock-state scattering from a two-level system”, *Phys. Rev. A* **82**, 063816 (2010).
66. P. Longo, P. Schmitteckert und K. Busch, “Few-photon transport in low-dimensional systems: Interaction-induced radiation trapping”, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 023602 (2010).
67. P. Longo, P. Schmitteckert und K. Busch, “Few-photon transport in low-dimensional systems”, *Phys. Rev. A* **83**, 063828 (2011).
68. E. Rephaeli und S. Fan, “Stimulated emission from a single excited atom in a waveguide”, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 143602 (2012).
69. B. Q. Baragiola, R. L. Cook, A. M. Brańczyk und J. Combes, “ $N$ -photon wave packets interacting with an arbitrary quantum system”, *Phys. Rev. A* **86**, 013811 (2012).
70. M. Fleischhauer, A. Imamoglu und J. P. Marangos, “Electromagnetically induced transparency: optics in coherent media”, *Rev. Mod. Phys.* **77**, 633 (2005).
71. K. Bergmann, H. Theuer und B. W. Shore, “Coherent population transfer among quantum states of atoms and molecules”, *Rev. Mod. Phys.* **70**, 1003 (1998).
72. A. A. Abdumalikov, O. Astafiev, A. M. Zagoskin, Y. A. Pashkin, Y. Nakamura und J. S. Tsai, “Electromagnetically induced transparency on a single artificial atom”, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 193601 (2010).
73. O. V. Astafiev, A. A. Abdumalikov, A. M. Zagoskin, Y. A. Pashkin, Y. Nakamura und J. S. Tsai, “Ultimate on-chip quantum amplifier”, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 183603 (2010).
74. D. E. Chang, A. S. Sorensen, E. A. Demler und M. D. Lukin, “A single-photon transistor using nanoscale surface plasmons”, *Nat. Phys.* **3**, 807 (2007).
75. Z. R. Gong, H. Ian, L. Zhou und C. P. Sun, “Controlling quasibound states in a one-dimensional continuum through an electromagnetically-induced-transparency mechanism”, *Phys. Rev. A* **78**, 053806 (2008).
76. P. Kolchin, R. F. Oulton und X. Zhang, “Nonlinear Quantum Optics in a Waveguide: Distinct Single Photons Strongly Interacting at the Single Atom Level”, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 113601 (2011).

77. T. S. Tsoi und C. K. Law, “Single-photon scattering on  $\Lambda$ -type three-level atoms in a one-dimensional waveguide”, *Phys. Rev. A* **80**, 033823 (2009).
78. D. Witthaut und A. S. Sørensen, “Photon scattering by a three-level emitter in a one-dimensional waveguide”, *New J. Phys.* **12**, 043052 (2010).
79. D. Roy, “Two-photon scattering by a driven three-level emitter in a one-dimensional waveguide and electromagnetically induced transparency”, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 053601 (2011).
80. H. Zheng, D. J. Gauthier und H. U. Baranger, “Strongly correlated photons generated by coupling a three- or four-level system to a waveguide”, *Phys. Rev. A* **85**, 043832 (2012).
81. M. Moeferd, P. Schmitteckert und K. Busch, “Correlated photons in one-dimensional waveguides”, *Opt. Lett.* **38**, 3693 (2013).
82. P. Longo, J. H. Cole und K. Busch, “The Hong-Ou-Mandel effect in the context of few-photon scattering”, *Opt. Express* **20**, 12326 (2012).
83. C. Martens, *Photonentransport in eindimensionalen Wellenleitern mit seitengekoppelten Drei-Niveau-Systemen*. Diplomarbeit (Karlsruher Institut für Technologie (KIT), 2011).
84. A. Steane, “Quantum computing”, *Rep. Prog. Phys.* **61**, 117 (1998).
85. N. Gisin, G. Ribordy, W. Tittel und H. Zbinden, “Quantum cryptography”, *Rev. Mod. Phys.* **74**, 145 (2002).
86. I. M. Georgescu, S. Ashhab und F. Nori, “Quantum simulation”, *Rev. Mod. Phys.* **86**, 153 (2014).
87. A. Gonzalez-Tudela, D. Martin-Cano, E. Moreno, L. Martin-Moreno, C. Tejedor und F. J. Garcia-Vidal, “Entanglement of two qubits mediated by one-dimensional plasmonic waveguides”, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 020501 (2011).
88. D. Martín-Cano, A. González-Tudela, L. Martín-Moreno, F. J. García-Vidal, C. Tejedor und E. Moreno, “Dissipation-driven generation of two-qubit entanglement mediated by plasmonic waveguides”, *Phys. Rev. B* **84**, 235306 (2011).
89. H. Zheng und H. U. Baranger, “Persistent quantum beats and long-distance entanglement from waveguide-mediated interactions”, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 113601 (2013).
90. C. Gonzalez-Ballester, E. Moreno und F. J. Garcia-Vidal, “Generation, manipulation, and detection of two-qubit entanglement in waveguide QED”, *Phys. Rev. A* **89**, 042328 (2014).
91. M. Pletyukhov und V. Gritsev, “Quantum theory of light scattering in a one-dimensional channel: Interaction effect on photon statistics and entanglement entropy”, *Phys. Rev. A* **91**, 063841 (2015).
92. J. H. Eberly, “Schmidt analysis of pure-state entanglement”, *Laser Phys.* **16**, 921 (2006).
93. J. F. M. Werra, P. Longo und K. Busch, “Spectra of coherent resonant light pulses interacting with a two-level atom in a waveguide”, *Phys. Rev. A* **87**, 063821 (2013).
94. M. P. Schneider, C. Martens, T. Sproll und K. Busch, “Tunability of a one-dimensional waveguide with an embedded two-level system subjected to few photon wavepackets”, (in Vorbereitung).
95. R. H. Dicke, “Coherence in spontaneous radiation processes”, *Phys. Rev.* **93**, 99 (1954).

96. R. G. DeVoe und R. G. Brewer, "Observation of superradiant and subradiant spontaneous emission of two trapped ions", *Phys. Rev. Lett.* **76**, 2049 (1996).
97. A. F. van Loo, A. Fedorov, K. Lalumière, B. C. Sanders, A. Blais und A. Wallraff, "Photon-mediated interactions between distant artificial atoms", *Science* **342**, 1494 (2013).
98. A. Goban, C.-L. Hung, J. D. Hood, S.-P. Yu, J. A. Muniz, O. Painter und H. J. Kimble, "Superradiance for atoms trapped along a photonic crystal waveguide", *Phys. Rev. Lett.* **115**, 063601 (2015).
99. T. Sproll. Dissertation (in Vorbereitung).
100. C. W. Hsu, B. Zhen, J. Lee, S.-L. Chua, S. G. Johnson, J. D. Joannopoulos und M. Soljacic, "Observation of trapped light within the radiation continuum", *Nature* **499**, 188 (2013).
101. S. John und J. Wang, "Quantum electrodynamics near a photonic band gap: Photon bound states and dressed atoms", *Phys. Rev. Lett.* **64**, 2418 (1990).
102. S. John und T. Quang, "Spontaneous emission near the edge of a photonic band gap", *Phys. Rev. A* **50**, 1764 (1994).
103. P. Meystre und M. Sargent III, *Elements of Quantum Optics* (Springer, Berlin, 2007).
104. <<http://www.pong-story.com/>>. Abgerufen am 7. Oktober 2015 um 11.26 Uhr.
105. N. E. Rehler und J. H. Eberly, "Superradiance", *Phys. Rev. A* **3**, 1735 (1971).
106. A. Crubellier, S. Liberman, D. Pavolini und P. Pillet, "Superradiance and subradiance. I. Interatomic interference and symmetry properties in three-level systems", *J. Phys. B* **18**, 3811 (1985).
107. M. P. Schneider und K. Busch, "Decay properties of an atom coupled to a disordered waveguide", (in Vorbereitung).
108. S. Cova, M. Ghioni, A. Lacaita, C. Samori und F. Zappa, "Avalanche photodiodes and quenching circuits for single-photon detection", *Appl. Opt.* **35**, 1956 (1996).
109. R. J. Glauber, "The quantum theory of optical coherence", *Phys. Rev.* **130**, 2529 (1963).
110. G. Mahler und V. A. Weberruß, *Quantum Networks : Dynamics of Open Nanostructures* (Springer, Berlin, 1995).
111. G. Kimura, "The Bloch vector for N-level systems", *Phys. Lett. A* **314**, 339 (2003).
112. R. A. Bertlmann und P. Krammer, "Bloch vectors for qudits", *J. Phys. A* **41**, 235303 (2008).